



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO DE CIÊNCIAS AGRÁRIAS E ENGENHARIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**FILTRO DE PARTÍCULAS ACELERAÇÃO-REPONDERAÇÃO EM UM
PROBLEMA REFERÊNCIA DA ENGENHARIA QUÍMICA**

RAYANI XAVIER HOFFMANN

ALEGRE, ES

2017

RAYANI XAVIER HOFFMANN

**FILTRO DE PARTÍCULAS ACELERAÇÃO-REPONDERAÇÃO EM UM
PROBLEMA REFERÊNCIA DA ENGENHARIA QUÍMICA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química do Centro de Ciências Agrárias e Engenharia da Universidade Federal do Espírito Santo, como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Química.

Área de Concentração: Engenharia Química

Linha de Pesquisa: Modelagem, Otimização e Análise de Processos

Orientador: Prof. Dr. Wellington Betencurte da Silva

Coorientador: Prof. Dr. Julio Cesar Sampaio Dutra

ALEGRE, ES

Fevereiro, 2017

Hoffmann, Rayani Xavier, 1990-
H711f Filtro de partículas aceleração-reponderação em um problema
referência da engenharia química / Rayani Xavier Hoffmann. – 2017.
79 f. : il.

Orientador: Wellington Betencurte da Silva.

Coorientador: Júlio Cesar Sampaio Dutra.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade
Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Agrárias e Engenharias.

1. Processos químicos. 2. Filtro de Partículas. 3. Problemas
inversos. 4. Reservatórios. 5. Reação de Van der Vusse. I. Silva,
Wellington Betencurte da. II. Dutra, Júlio Cesar Sampaio. III.
Universidade Federal do Espírito Santo. Centro de Ciências Agrárias e
Engenharias. IV. Título.


CDU: 66.0

**FILTRO DE PARTÍCULAS ACELERAÇÃO-REPONDERAÇÃO EM UM
PROBLEMA REFERÊNCIA DA ENGENHARIA QUÍMICA**

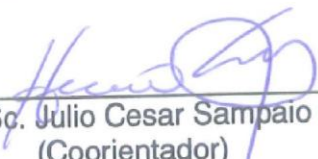
RAYANI XAVIER HOFFMANN

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química do Centro de Ciências Agrárias e Engenharia da Universidade Federal do Espírito Santo, como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Química.

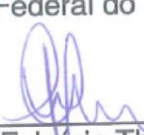
Aprovada em 13 de fevereiro de 2017:



Prof. D. Sc. Wellington Betencurte da Silva
(Orientador)
Universidade Federal do Espírito Santo



Prof. D. Sc. Julio Cesar Sampaio Dutra
(Coorientador)
Universidade Federal do Espírito Santo



Prof. D. Sc. Fabricio Thiengo Vieira
Universidade Federal do Espírito Santo



Prof. D. Sc. Jose Mir Justino da Costa
Universidade Federal do Amazonas

AGRADECIMENTOS

Agradeço em especial o professor Wellington Betencurte da Silva que me orientou neste trabalho, pelo incentivo, dedicação e paciência durante todo o processo de aprendizagem. O professor Julio Cesar Sampaio Dutra, com toda dedicação e paciência. A Reinaldo Antonio Gomes Marques pela ajuda neste trabalho.

Agradeço a todos os meus amigos, que me acompanharam nessa nova etapa da minha vida. A Luciana que tem sido amiga para todas as horas. Mesmo longe, sempre dedicada e ouvindo as minhas reclamações e me apoiando em todas as decisões importantes na minha vida. A Patrícia que sempre distante está presente com seus conselhos fieis. A Jamili e Natali que com suas brigas conquistaram meu carinho e respeito. A Ariane, que com seu jeitinho conquistou um pedaço no meu coração. A senhorita Carol, que será minha segunda amiga doutora, todo sucesso do mundo para você.

Agradeço aos companheiros fieis do laboratório, que aturaram minhas loucuras por quase dois anos. Sem vocês os dias teriam sido mais longos e sem animação.

Agradeço também à minha família, em especial meus pais Martin Afonso e Ana Rosa, minha irmã Raphisa, por terem me dado todo apoio possível para completar essa missão, todo agradecimento é pouco a vocês.

Agradeço à banca por aceitarem o convite de participar na avaliação deste trabalho. Por fim, agradeço ao órgão financiador CAPES, pelo fomento desta pesquisa.

RESUMO

HOFFMANN, Rayani Xavier. **Filtro de Partícula Aceleração-Ponderação em um Problema Referência da Engenharia Química**. 2017. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Espírito Santo, Alegre, ES. Orientador: Prof. D. Sc. Wellington Betencurte da Silva. Coorientador: Prof. D.Sc. Julio Cesar Sampaio Dutra.

Devido aos constantes avanços computacionais, bem como o desenvolvimento de eficientes métodos para a solução de problemas não-lineares, tem-se tornado interessante o uso de estimação *on-line* em processos químicos não-lineares. Neste contexto, a busca por métodos mais rápidos e robustos se tornaram um desafio para os pesquisadores, pois permite a realização de estimativas em tempo real de variáveis infreqüentemente medidas e de variáveis de estados e parâmetros desconhecido que são variantes no tempo. Desta forma, a estimação de estados tem como objetivo usar a informação disponível através do modelo do processo e das medições para obter estimativas de estados do sistema. Esta informação pode ser usada para o monitoramento, otimização e controle do processo. Assim, esta dissertação tem como objetivo aplicar os filtros de partículas Amostragem e Reamostragem por Importância (SIR) e Aceleração-Reponderação (AR) à estimação de estados em um problema de reservatório de petróleo e o *benchmark* van der Vusse. Para isso, são discutidos os vários métodos de estimação, tendo foco nos filtros de partículas. Em seguida, foram simulados os dois casos propostos neste trabalho, para aplicação dos algoritmos dos filtros de partículas. Os resultados para ambos os filtros foram satisfatórios, porém o filtro AR obteve melhor desempenho. Essa metodologia mostra os benefícios quando se usa um pequeno número de partículas e a abordagem de reponderação pode ser promissora para atenuar a assimetria na distribuição dos pesos de partículas, obtendo assim melhores resultados para a inferência Bayesiana *on-line* e evitando a necessidade do uso da reamostragem, que é um dificultador do filtro SIR.

Palavras-chave: Processos Químicos, Filtro de Partículas, Problemas Inversos, Reservatório, Reação de van der Vusse.

ABSTRACT

HOFFMANN, Rayani Xavier. **Particle Filter Move-Reweighting in a Benchmark Problem of Chemical Engineering**. 2017. Dissertation. (Master degree in Chemical Engineering) – Federal University of Espírito Santo, Alegre, ES. Adviser: Prof. D. Sc. Wellington Betencurte da Silva. Co-adviser: Prof. D. Sc. Julio Cesar Sampaio Dutra.

Due to the constant computational advances, as well as the development of efficient methods for solving nonlinear problems, it has become interesting the use on-line estimation on nonlinear chemical processes. In this context, the search for more faster and robust methods have become a challenge for researchers, for allows the accomplishment of real-time estimates of unmeasured or infrequently-measured variables, states variables and unknown or time-variant model parameters. Therefore, state estimation aims to use the information available through the process model and the measurements to obtain estimates of system states. This information can be used for monitoring, optimization and process control. For these reasons, the present work is aimed the application the Sampling Importance Resampling (SIR) and Move-Reweighting (AR) filters to the state estimation in an oil reservoir problem and the van der Vusse benchmark. For this, the various estimation methods are discussed, focusing on the particle filters. Next, the two cases proposed in this work were simulated for the application of particle filter algorithms. The results for both filters were satisfactory, but the AR filter obtained better performance. This methodology shows the benets when using a small number of particles and the move-reweighting approach can be promising to attenuate the asymmetry in the distribution of the particle weights, thus obtaining better results for online Bayesian inference and avoiding the need to use the resampling, which is a SIR filter problem.

Keywords: Chemical Processes, Particle Filter, Inverse Problems, Reservoir, van der Vusse reaction.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Distribuição normal. Fonte: (BISHOP, 2006).	29
Figura 2 – Esquema de dependência. Fonte: KAPIO e SOMERSALO (2004), modificado pelo autor.	38
Figura 3 – Reamostragem. Fonte: COSTA (2015).	41
Figura 4 - Representação esquemática de um CSTR. Fonte: CHEN, KREMLING e ALLGÖWER (1995), modificado pelo autor.	56
Figura 5- Estimativa da saturação para o Modelo de Buckely-Leverett usando o filtro SIR para 500 partículas.	62
Figura 6 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckely-Leverett usando o filtro AR para 20 partículas.	63
Figura 7 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckely-Leverett usando o filtro AR para 50 partículas.	63
Figura 8 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckely-Leverett usando o filtro AR para 100 partículas.	64
Figura 9 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckely-Leverett usando o filtro AR para 500 partículas.	64
Figura 10 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 50 partículas.	66
Figura 11 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 100 partículas.	67
Figura 12 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 500 partículas.	67
Figura 13 - Estimativa da concentração de A para o problema de Van der vusse, usando o filtro SIR para 50 partículas.	68
Figura 14 – Estimativa da concentração de A para o problema de Van der vusse, usando o filtro SIR para 100 partículas.	68
Figura 15 – Estimativa da concentração de A para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 500 partículas.	69
Figura 16 – Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 50 partículas.	69
Figura 17 – Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 100 partículas.	70

Figura 18 – Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 500 partículas.	70
Figura 19 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro AR para 50 partículas.	71
Figura 21 – Estimativa da concentração de A para o problema de Van der vusse, usando o filtro AR para 50 partículas.....	71
Figura 22 – Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro AR para 50 partículas.	72

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Algoritmo do filtro SIR (SILVA, 2012).	41
Tabela 2 – Filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC (MARQUES, STORKVIK, 2013).	46
Tabela 3 - Algoritmo do filtro SIR para o problema de reservatório de petróleo.	51
Tabela 4 - Filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC.	53
Tabela 5 – Coeficientes constantes da reação van der Vusse.	57
Tabela 6 - Ponto de operação da reação van der Vusse.	57
Tabela 7 - Algoritmo do filtro SIR para	58
Tabela 8 - Filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC.	59
Tabela 9 - Resultado dos filtros AR e SIR para diferentes números de partículas. ..	65
Tabela 10 - Resultado dos filtros AR e SIR para diferentes números de partículas. ..	72

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	Objetivo.....	14
1.2	Trabalhos Preliminares	15
1.3	Organização do trabalho.....	16
2	REVISÃO DE LITERATURA.....	17
2.1	Estimação de Estados	17
2.2	Estimação de Estado usando Filtros Bayesianos	18
2.2.1	Problemas de Estimação de Estados Aplicados a Reservatórios de Petróleo....	20
2.2.2	Problemas de Estimação de Estados Aplicados a Sistema de reação de van der Vusse	22
2.3	Comentários Finais.....	23
3	CONCEITOS BÁSICOS	24
3.1	Probabilidade	24
3.2	Probabilidade Bayesiana.....	26
3.3	Distribuição de Probabilidade.....	27
3.4	Distribuição Normal	28
3.5	Comentários Finais.....	29
4	MÉTODOS DE MONTE CARLO SEQUENCIAL.....	30
4.1	Processos Estocásticos.....	30
4.1.1	Monte Carlo via Cadeias de Markov	31
4.1.2	Inferência Bayesiana.....	32
4.1.3	Integração por Monte Carlo	34
4.2	Métodos de Simulação	35
4.2.1	Aceitação-Rejeição	35
4.2.2	Amostragem por Importância	35
4.3	Problema de Estimação de Estado	36
4.3.1	Filtros de Partículas	38
4.4	Reamostragem Móvel.....	42
4.5	Filtro de Partículas Aceleração-Reponderação (<i>Particle Filter Move-Reweight</i> ing) ..	43
4.5.1	Passo móvel com núcleos MCMC.....	43
4.6	Comentários Finais.....	46
5	METODOLOGIA.....	48

5.1	Caso 1	48
5.1.1	Problema Direto	49
5.1.2	Problema Inverso.....	50
5.2	Caso 2	53
5.2.1	Problema direto.....	56
5.2.2	Problema Inverso.....	58
5.3	Comentários Finais.....	60
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO	61
6.1	Caso 1	62
6.2	Caso 2.....	66
7	CONCLUSÃO.....	74
	REFERÊNCIAS.....	75

1 INTRODUÇÃO

As mudanças sofridas pelo mundo se tornam cada vez mais aprimoradas ao longo do tempo, exigindo cada vez mais produtos com qualidade e funcionalidade a preços competitivos, antes objetivo secundário das empresas, hoje é a principal meta. Desta forma, a estagnação evolutiva de um produto para uma empresa pode fazer com que esta perca lucros, e uma parte considerável do mercado para suas concorrentes.

Devido a estes fatores, as indústrias procuram cada vez mais por estratégias de monitoramento, otimização e controle de processos que venham a agregar tecnologia e menos custos aos produtos. Sendo assim, muitos estudos deixam de ter importância preponderantemente acadêmica e passam a ser cada vez mais necessárias industrialmente, impulsionando definitivamente o projeto otimizado de produtos. Neste sentido a estimação se torna interessante, pois permite o acompanhamento em tempo real de variáveis com poucas medições, variáveis de estado e parâmetros de processos desconhecidos ou variantes no tempo ou de difícil medição (TONEI, 2008, ZHAO; HUANG; LIU, 2012).

A estimação de estados tem como objetivo usar a informação disponível através do modelo do processo e das medições para obter estimativas de estados de difícil medições do sistema dinâmico. Esta informação pode ser usada para o monitoramento, otimização e controle do processo (VALAPPIL; GEORGAKIS, 2000). Esses problemas podem ser resolvidos por meio dos Métodos de Monte Carlo.

Os métodos de Monte Carlo consistem em técnicas de simulação para a solução de problemas de estimação, no qual os estimadores têm uma distribuição complexa, como por exemplo, quando a função de distribuição não possuiu solução analítica. Devido ao grande potencial da metodologia Monte Carlo, várias técnicas foram desenvolvidas. As técnicas de filtragem via sistemas de partículas, como os métodos Sequenciais de Monte Carlo (MSMC), Monte Carlo Híbrido (HMC), etc, são algumas delas (PINTO, 2007).

Os problemas de estimação, podem ser resolvidos através de diversos métodos como de Levenberg-Marquardt, Gradiente Conjugado, Monte Carlo via Cadeia de Markov e os métodos Bayesianos.

Os métodos de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC) são uma aproximação comum para amostragens de uma distribuição de probabilidade complexa. Porém, os métodos MCMC são algoritmos iterativos, inadequados para problemas de estimação

recursivas. Uma solução seria a utilização dos métodos de amostragem por importância e amostragem por importância sequencial (PINTO, 2007).

O método amostragem por importância não é adequado para estimação recursiva, pois sua complexidade computacional aumenta com o tempo. No caso do método amostragem por importância sequencial, a distribuição dos pesos se torna cada vez mais assimétrica com o passar do tempo e, conseqüentemente, o algoritmo falha ao tentar representar a distribuição a posteriori adequadamente (VALLE, 2005).

Nos filtros de partículas todas as informações disponíveis são utilizadas, com a finalidade de reduzir a incerteza presente no problema. A base do procedimento estatístico é formada ao combinar a informação anterior com a nova informação obtida. Essas técnicas são especialmente úteis em problemas em que os dados observados são avaliados sequencialmente no tempo e quando se está interessado em realizar inferência em uma estimação *on-line*. Esses métodos requerem a geração de um conjunto inicial de partículas que então são progressivamente reamostradas levando em consideração os dados de entrada e os parâmetros (PINTO, 2007, SILVA, 2012).

1.1 Objetivo

O presente trabalho tem como objetivo aplicar e avaliar o desempenho do filtro de partículas Aceleração-Reponderação junto ao conceito de estimativa de estado para um problema de escoamento bifásico óleo-água em meio poroso e para a reação van der Vusse em um reator CSTR. O modelo estudado para o problema de reservatório já foi abordado por Hoffmann (2014).

Este método foi escolhido em detrimento dos métodos que utilizam a reamostragem, devido a Marques e Storvik (2013) que propuseram uma estratégia alternativa, em que a ordem de atualização das iterações das cadeias de Markov e as etapas de reamostragem são mudadas, ou seja, ocorre primeiro a atualização de passos do MCMC. Desta forma, os pesos podem ser atualizados simultaneamente, o que pode evitar ou atrasar a necessidade do passo de reamostragem. O passo de reamostragem é um inconveniente do método SIR, desta forma estes métodos serão comparados para analisar o desempenho dessa nova versão proposta por Marques e Storvik.

Os dados gerados após a simulação do problema direto serão utilizados para estimação da saturação da água, para o caso do modelo de reservatório, bem como a temperatura do reator e as concentrações de C_A e C_B . Podendo, assim, escolher a melhor forma de monitoramento das propriedades do reservatório de petróleo e as variáveis que influenciam a produção do componente B.

1.2 Trabalhos Preliminares

Esta pesquisa de dissertação foi desenvolvida no grupo de pesquisa em Métodos Computacionais, Controle e Estimação (LAMCES) da Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), no campus Centro de Ciências Agrárias e Engenharias. Este grupo trata de pesquisas relacionadas com reservatório de petróleo, controle de processos poliméricos e de beneficiamento de minérios, e operação de reatores químicos. A estes problemas são aplicadas estratégias de estimação via filtro de partículas e em alguns casos, associados a controles. O estudo dessa dissertação e outros trabalhos que utilizaram filtros de partículas, gerou os trabalhos preliminares descritos abaixo.

“Application of State Estimation with Particle Filter in Chemical Reactors”, considerando um estudo sobre a produção de propileno glicol em um reator CSTR. Os resultados do estudo desse trabalho foram publicados em forma de artigo e apresentado no XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, em Fortaleza (HOFFMANN *et al.*, 2016). Um outro artigo, que será submetido para revista internacional, encontra-se em fase final do manuscrito e posterior submissão e versa sobre a aplicação do filtro AR para os casos, reação de van der Vusse, reservatório de petróleo e um sistema pipe-in-pipe, com o título “*Sequential state inference of engineering systems through the particle move-reweighting algorithm*”.

1.3 Organização do trabalho

O trabalho está organizado da seguinte forma: o capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica de estimação de estado e uma breve revisão sobre problemas inversos.

No capítulo 3 serão apresentados alguns conceitos importantes para o melhor entendimento sobre estimação de estado, além dos métodos Sequenciais de Monte Carlo, no qual aborda Monte Carlo via Cadeias de Markov, inferência Bayesiana, integração de Monte Carlo, amostragem por importância, filtros de partículas e por fim o filtro de partículas aceleração-reponderação.

No capítulo 4 será apresentada a metodologia abordada para os dois casos estudados neste trabalho para a aplicação dos dois filtros propostos, além do modelo de Buckley-Leverett para um reservatório de petróleo e o modelo de reação de van der Vusse para um reator CSTR. O capítulo 5 aborda os resultados e discussão obtidos com a metodologia descrita no capítulo 4. E, por fim, o capítulo 6 traz as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Estimação de Estados

Para muitos sistemas reais, os estados não podem ser medidos diretamente, consequentemente estimadores de estado podem ser utilizados para estimá-los a partir de medições e conhecimento das variáveis de entrada do modelo. Existem diversos métodos de estimação na literatura, tais como o método de máxima verossimilhança, em que os estimadores são obtidos a partir da maximização da função de verossimilhança, o método dos momentos em que os estimadores são obtidos igualando-se os momentos amostrais aos correspondentes momentos populacionais, os métodos dos mínimos quadrados em que os estimadores são os valores que minimizam uma soma de quadrados de erros entre os valores da amostra e uma função de parâmetros e os métodos bayesianos que serão detalhados nos próximos capítulos (TONEL, 2008, BOLFARINE; SANDOVAL, 2002).

Os dois objetivos básicos da estimação de estados são:

1. Fazer estimação dos estados não medidos a partir de medições de processo;
2. Reduzir a influência do ruído nos estados estimados e medidos.

A estimação de estado aparece em muitos problemas de aplicações industriais. Muitas vezes, o conhecimento prévio sobre o processo conhecido como um modelo de transição de estado está disponível. Dada a função de verossimilhança que relaciona estados com medidas e a distribuição prévia, os métodos bayesianos fornecem uma solução estatística sequencial. Do ponto de vista Bayesiano, o objetivo de estimação de estado é inferir sobre a função de distribuição de probabilidade (*Probability Distribution Function* - PDF) do estado usando a distribuição *a priori* e a função de verossimilhança, que é conseguido por iteração, através de um modelo de transição de estado e atualizando a estimação usando medições atuais.

Os Métodos Bayesianos têm sido amplamente aplicados e estudados em muitos campos da engenharia, tais como monitoramento de processos, otimização, etc (ZHAO; HUANG; LIU, 2012).

Muitos métodos bayesianos são utilizados para a estimação de estado com base em vários pressupostos do modelo do sistema. Como exemplo, o Filtro de Kalman (*Kalman Filter* - KF), um dos métodos bayesianos mais populares, é derivado para um

modelo de sistema dinâmico gaussiano e linear, enquanto o filtro de Kalman estendido (*Extended Kalman Filter* – EKF), o filtro de Kalman *Unscented* (*Unscented Kalman Filter* – UKF) e o estimador de horizonte móvel (*Moving Horizon Estimator* - MHE) são derivados de um sistema não-linear Gaussiano, que aproxima a distribuição *a posteriori* para gaussiana e lineariza as equações não-lineares do modelo, porém esses métodos sofrem com a restrição do pressuposto gaussiano (ZHAO; HUANG; LIU, 2012, ZHAO *et al.*, 2012).

No entanto, os processos reais normalmente envolvem não-linearidade e não-gaussianidade. Nestes casos, a simulação dos filtros de partículas (*Particle Filter* - PF) baseados no método de Monte Carlo, fornece uma abordagem conveniente para representar e gerar recursivamente uma aproximação da PDF. O PF emprega o método de Monte Carlo para obter um conjunto de partículas aleatórias (amostras) com seus pesos associados, e a PDF é estimada pela média ponderada dessas partículas e seus respectivos pesos (KAPIO; SOMERSALO; 2004, ZHAO; HUANG; LIU, 2012).

2.2 Estimação de Estado usando Filtros Bayesianos

Existem situações em que as medidas, que constituem os dados de um problema inverso, são feitas em um meio não-estacionário. Mais precisamente, pode acontecer que as quantidades físicas sejam dependentes do tempo e os dados medidos dependam destas quantidades em momentos diferentes. Sendo assim, estes tipos de problemas inversos são chamados de não-estacionários (KAPIO, SOMERSALO, 2004).

A aplicação de problemas inversos pode ser feita em diversas áreas como nas engenharias: aeroespacial (estimar fluxo de calor em sistema de proteção térmica), biomédica (imagem de tomografias), química (concentração de traços químicos com controle), civil (localização de falhas em estruturas), computação (reconhecimento de voz) e mecânica (estimar propriedades termofísicas) (COSTA, 2015).

Segundo Hadamard (1953), problemas inversos são matematicamente classificados como mal-postos, pois sua solução não satisfaz uma das condições de existência, unicidade e estabilidade. Esta característica faz com que, em alguns casos, exista a necessidade de usar técnicas de regularização. A utilização dessas técnicas em

problemas inversos permite estimar parâmetros e funções. Devido a essas condições, diversos métodos já foram desenvolvidos, como os métodos de Levenberg-Marquardt, Gradiente Conjugado e de Monte Carlo via Cadeia de Markov. Atualmente, outra metodologia vem sendo bastante estudada, como os filtros Bayesianos, em particular o filtro Kalman, e os filtros de partículas, como o *Sampling Importance Resampling* (SIR) e o *Auxiliary Sampling Importance Resampling* (ASIR), para solução de problemas de estimativa de estado (ORLANDE *et al.*, 2011).

Um outro filtro bastante utilizado que, além de estimar as variáveis de estado de um problema dinâmico incorpora as incertezas associadas aos parâmetros do modelo é o desenvolvido por Liu e West (2001), chamado de filtro para Estimativa Combinada de Parâmetros e Variáveis de Estado.

Os filtros de partículas, os quais combinam amostragem por importância, reamostragem por importância e Monte Carlo via Cadeias de Markov (*Markov chain Monte Carlo* - MCMC), sofrem com o problema da degeneração progressiva da amostra quando o algoritmo avança no tempo. Desta forma, visando diminuir essa degeneração, os autores Gilks e Berzuini (2001) propuseram uma nova técnica, com base nas metodologias existentes. O novo método para a análise dinâmica bayesiana é chamado de algoritmo *resample-move* (RM), que utiliza passos do algoritmo SIR e do MCMC, para evitar a degeneração que ocorrem em outros métodos existentes.

Muitos autores têm realizado análises detalhadas e teóricas de problemas inversos, usando técnicas de inferência Bayesiana para a solução de diversos problemas. Por exemplo, Chen, Morris e Martin (2005) aplicaram os filtros de partículas para estado *on-line* e estimativa de parâmetro em um reator de polimerização em batelada. Para a estimação de estado, foi empregado o filtro SIR e, para os parâmetros desconhecidos, o método de suavização via kernel foi incorporado no filtro de partículas para obter estimativas robustas para ambos os parâmetros fixos e variáveis no tempo. O filtro de partículas obteve bons resultados quando inferiu as propriedades do polímero, mas para a constante de velocidade de terminação as estimativas não foram satisfatórias. Segundo os autores os filtros de partículas são atraentes para aplicações que requerem estimativa de estado *on-line* de modelos mecanísticos, tais como monitoramento de qualidade baseado em modelo, controle preditivo e retificação de dados.

Marques e Storkiv (2013) propuseram uma técnica semelhante à de Gilks e Berzuini (2001), porém a ideia foi introduzir a reponderação das partículas após o passo *move*

MCMC. Assim, o passo móvel é executado antes da reamostragem, seguida pela atualização dos pesos.

Costa *et al.* (2015) aplicaram os filtros de partículas para estimar os parâmetros e as variáveis de estado de um modelo de crescimento de tumor, através de modelos matemáticos, utilizando as abordagens Bayesianas. O sistema de equações diferenciais ordinárias não-lineares foi usado como o modelo de evolução de estado, no qual os números de células tumorais, células normais e células angiogênicas eram as variáveis de estado. Os resultados obtidos para diferentes desvios padrão mostraram que o procedimento de solução foi muito preciso e robusto. Mostrando que esta metodologia teve um bom desempenho.

2.2.1 Problemas de Estimação de Estados Aplicados a Reservatórios de Petróleo

A maioria dos reservatórios de petróleo e gás são enterrados abaixo de milhares de metros de sobrecarga. Observações diretas do reservatório estão disponíveis apenas em poços que são, muitas vezes de centenas de metros de profundidade. As observações indiretas são tipicamente feitas na superfície, quer no local de extração (a partir das taxas de produção e pressões), quer em locais distribuídos (por meio de análises sísmica). No problema inverso, as observações são usadas para determinar as variáveis que descrevem o sistema. Desta forma, o problema inverso consiste em resolver o conjunto de equações para as variáveis do modelo, com o objetivo de fazer previsões precisas do desempenho futuro (OLIVER; REYNOLDS; LIU, 2008).

Seiler *et al.* (2009) usaram o filtro EnKF (Ensemble Kalman Filter) para comparar modelos de simulação de reservatório e discutir onde uma função de custo podia ser minimizada. Além disso, ele é utilizado com um exemplo de campo para ilustrar as propriedades deste método e mostrar que ao introduzir parâmetros adicionais ao modelo, como a permeabilidade relativa, conduz a uma melhora significativa dos resultados comparados com estudos anteriores. Sendo assim, o EnKF fornece um conjunto de realizações de reservatórios atualizadas, condicionadas aos dados de produção, bem como estimativas melhoradas dos parâmetros do modelo, variáveis de estado e sua incerteza. Ele constitui um ótimo ponto de partida para fazer previsões com estimativas de incerteza.

No trabalho de Hanea e Gheorghe (2011) foi estimado o campo de permeabilidade de um reservatório. O fluxo de fluido foi caracterizado por um modelo de fluxo 2D bifásico (água-óleo). Esse pode ser representado através de um sistema de equações diferenciais parciais não lineares acopladas que não podem ser resolvidas analiticamente. Assim, os autores apresentaram um modelo de espaço-estado para o reservatório. Existem várias maneiras de representar os modelos de espaço de estados, sendo um dos mais comuns o Filtro de Kalman (KF) e as suas variantes. Hanea e Gheorghe (2011) compararam o EnKF e uma nova abordagem (baseada em modelos gráficos), sendo essa uma rede bayesiana não-paramétrica dinâmica (*Dynamic Non-parametric Bayesian Network* - NPBN). Os dois métodos apresentaram dependência espacial diferente entre as variáveis de permeabilidade. A metodologia NPBN foi mais sensível às medições ruins, muito mais do que o EnKF. Portanto, o primeiro beneficia-se de uma melhor estimativa do ruído de medição. Outra melhoria que os autores elaboraram através do método NPBN, foi a incorporação da variável saturação no modelo. O método EnKF usa variáveis contínuas para representar a saturação. Uma melhor representação da saturação seria utilizar variáveis aleatórias discretas. Ao contrário do EnKF, um NPBN pode modelar variáveis discretas e contínuas.

Segundo Raghu (2014), a alta heterogeneidade dos reservatórios de petróleo, representada por suas propriedades de rochas espacialmente variáveis (porosidade e permeabilidade), dita a quantidade de óleo recuperável. Deste modo, o autor estimou essas propriedades da rocha, que são cruciais para a previsão de desempenho futuro de um reservatório, através de uma técnica de correspondência histórica usando filtros de Kalman (EnKF) e filtros de partículas (PF).

Hoffmann *et al.* (2015) aplicaram os filtros Bayesianos para um problema de reservatório de petróleo com escoamento bifásico. O modelo utilizado para a obtenção das medidas foi Buckley e Leverett. Assim, os autores estimaram a saturação utilizando os filtros de partículas SIR e ASIR. Os resultados encontrados para os dois filtros mostraram-se satisfatórios ao estimar a saturação do reservatório de petróleo.

2.2.2 Problemas de Estimação de Estados Aplicados a Sistema de reação de van der Vusse

A estimação de estado tem aplicações importantes no controle preditivo de modelos não-lineares, bem como no monitoramento, precisão e detecção de falhas em processos químicos. Chen, Kremling e Allgöwer (1995) propuseram um problema *benchmark* para o projeto de sistema de controle não-linear. Este problema envolve o controle de um reator químico altamente não-linear que exhibe propriedades interessantes, como uma mudança de ganho de estado estacionário no ponto de operação principal. Este foi resolvido com um esquema de modelo de controle preditivo não-linear. Apesar da dificuldade da cinética de van der Vusse, tais como o ganho de estado estacionário, que muda o sinal no ponto de operação e a dinâmica zero, que muda as propriedades de estabilidade, este controlador conseguiu estabilidade e bom desempenho para mudanças no *set-point* e perturbações robusta. Além disso, os autores utilizaram um estimador de estado, sendo este o filtro de Kalman Estendido (*Extended Kalman Filter* – EKF) devido ao defasamento entre o modelo, a planta e os distúrbios não mensuráveis, que acarreta em mau desempenho ou mesmo a instabilidade.

Existem várias abordagens para estimar o estado em sistemas modelados por equações diferenciais ordinárias. Jorgensen (2007) aplicou o EKF para estimativa de estado em sistemas estocásticos contínuos-discretos não-lineares, no exemplo *benchmark* de van der Vusse. O autor percebeu que as medidas de temperatura não foram suficientes para fornecer uma estimativa de estado livre de deslocamento no estado estacionário e a taxa de convergência das estimativas de concentração foi limitada pela frequência das medições de concentração, o que implicou no desempenho em malha fechada para qualquer controlador, incluindo o controle preditivo não-linear.

Akesson *et al.* (2008) utilizaram covariâncias estimadas com o filtro de Kalman, juntamente com controle, para aumentar a precisão das estimativas de estado do problema de van der Vusse. O desempenho deste filtro foi comparado com o filtro de Kalman usual. Segundo os autores, o problema de estimação de covariância pode ser declarado como um problema de mínimos quadrados. Desta forma, foi empregado o método dos mínimos quadrados de autocovariância para sistemas com ruído mutuamente correlacionado.

Como foi mostrado no trabalho de Jorgensen (2007) que o EKF não foi capaz de estimar com precisão as concentrações do problema de Van de Vusse com base somente em medições de temperatura, Kulikov e Kulikova (2014) demonstraram que os métodos modernos de estimação de estados, como os *continuous-discrete Unscented Kalman Filters* (UKF) e o *Cubature Kalman Filters* (CKF) podem calcular as estimativas de concentração de *off-set* do exemplo estocástico de Van de Vusse com perturbação na concentração de alimentação, por meio apenas de medições de temperatura.

2.3 Comentários Finais

Este capítulo apresentou e avaliou a aplicação dos filtros de partículas em dois problemas bastante estudados no mundo acadêmico, um modelo de reservatório de petróleo com solução analítica, mais conhecido como modelo de Buckley-Leverett e um problema *benchmark* da engenharia química, o sistema de reação de van der Vusse. Além disso, uma breve revisão de literatura foi feita para ambos, com foco em problemas de estimação de estados.

Nos trabalhos estudados, percebeu-se uma tendência à utilização dos filtros de Kalman e suas variantes. Esses filtros são um dos métodos Bayesianos mais populares. Porém, para inúmeras aplicações esses métodos não são uma boa escolha. Desta forma, este trabalho propôs a utilização dos filtros de partículas, em particular o filtro SIR e o AR. Estes filtros serão comparados para averiguar o desempenho do filtro AR, que é uma combinação do filtro SIR com passos do MCMC. Assim, faz-se necessário o estudo teórico de ambos os filtros. Este estudo será apresentado no capítulo 4.

3 CONCEITOS BÁSICOS

3.1 Probabilidade

A probabilidade fornece uma estrutura consistente para a quantificação e manipulação da incerteza existente em fenômenos aleatórios e forma uma das bases centrais para o reconhecimento de padrões. Quando combinada com a teoria da decisão, essa nos permite fazer previsões ótimas com todas as informações disponíveis, mesmo sendo incompletas ou ambíguas (BISHOP, 2006). Além disso, a probabilidade é a base matemática sob a qual a estatística é construída (FARIAS; SOARES; CÉSAR, 2003). Antes de ser explicado o que é probabilidade, serão definidos alguns conceitos básicos:

- Experimento aleatório: Processo de aquisição de dados relativos a um fenômeno que apresenta variabilidade em seus resultados;
- Espaço amostral: Conjunto de todos os resultados possíveis de um experimento aleatório;
- Evento: Subconjunto do espaço amostral, podendo ser constituído de apenas um elemento, chamado de evento simples, até o número total de elementos do espaço amostral.

Embora a definição de probabilidade seja bem aceita, sua interpretação ou o sentido atribuído a ela varia consideravelmente. Desta forma, serão mencionadas as interpretações mais comuns: física (ou clássica), frequentista e subjetiva (MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015).

Na probabilidade clássica, qualquer evento é a razão entre o número de resultados favoráveis e o número total de possíveis resultados experimentais (ou, a ocorrência de um evento de interesse θ resultante de um experimento aleatório com espaço amostral definido por um conjunto E como sendo a relação entre o número de casos positivos ou favoráveis a ocorrência desse evento com o número total de casos), como mostra a Equação (1). É assumido implicitamente que todos os eventos elementares têm a mesma chance (ou seja, são equiprováveis). O conceito de probabilidade foi formulado primeiramente com base em ideias clássicas, que estão intimamente relacionadas com os jogos de azar (cartas, dados, moedas, etc.), na qual a suposição de chance igual é dada como certa (MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015).

$$\pi(\theta) = \frac{\text{número de casos favoráveis ao evento } \theta}{\text{número de casos do espaço amostral } E} \quad (1)$$

Essa definição clássica de probabilidade é válida apenas para os casos em que os eventos do espaço amostral são equiprováveis. Para os outros casos é necessário utilizar uma abordagem frequentista. A probabilidade de um evento θ , denotado por $\pi(\theta)$ pode ser dada pela Equação (2) (MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015).

$$\pi(\theta) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{m}{n} \quad (2)$$

Sendo m o número de vezes que θ ocorreu em n ensaios experimentais idênticos e independentes. Esta interpretação pretende ser objetiva, já que se baseia apenas em quantidades observáveis. No entanto, se o número de experimentos tenderem ao infinito, e considerando os eventos equiprováveis, a probabilidade frequentista tende à clássica (MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015).

Na interpretação subjetiva, a probabilidade de um evento θ é a medida do grau de crença racional ou confiança, na ocorrência de θ . Para enfatizar seu caráter subjetivo de probabilidade, e melhor denotar essa probabilidade por $\pi(\theta|y)$ onde y (de história) representa o conjunto de informações de que dispõe o indivíduo. Vale ressaltar que os valores de $\pi(\theta|y)$ não são iguais, pois dependem da informação y , que é diferente para cada caso (MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015).

Outras definições que são pertinentes ao entendimento das seções posteriores são (BISHOP, 2006):

- Probabilidade conjunta: É a probabilidade de ocorrência simultânea de dois ou mais eventos. Considerando os eventos θ e y , a probabilidade conjunta desses eventos será escrita como $\pi(\theta, y)$. Se os eventos θ e y são independentes, então essa é dada pela Equação (3).

$$\pi(\theta, y) = \pi(y)\pi(\theta) \quad (3)$$

- Probabilidade condicional: É a probabilidade de um dado evento ocorrer uma vez que um segundo evento tenha ocorrido, ou seja, $\pi(\theta|y)$ é a probabilidade de que o evento θ ocorra dado que o evento y tenha ocorrido (Equação (4)).

$$\pi(\theta|y) = \frac{\pi(\theta \cap y)}{\pi(y)} \quad (4)$$

- Probabilidade marginal: A regra de soma de probabilidade de uma variável também é conhecida como a probabilidade marginal, porque esta é obtida marginalizando ou somando as outras variáveis. A Equação (5) é utilizada quando se considera variáveis discretas e a Equação (6) para variáveis contínuas.

$$\pi(\theta) = \sum_y \pi(\theta, y) \quad (5)$$

$$\pi(\theta) = \int_y \pi(\theta, y) dy \quad (6)$$

3.2 Probabilidade Bayesiana

Até agora, a probabilidade foi vista em termos de frequências de eventos aleatórios que podem ser repetidos sob condições idênticas, sendo referida como a interpretação clássica ou frequentista da probabilidade. Neste momento iremos passar à visão bayesiana mais geral, na qual as probabilidades fornecem uma quantificação da incerteza. Sendo assim, é importante ter conhecimento do teorema de Bayes (BISHOP, 2006).

Supondo que não seja possível realizar medidas de probabilidade em termos clássicos ou frequentistas do evento θ (ou seja, o evento possui uma frequência de ocorrência extremamente baixa, ou não é possível observá-lo diretamente), segundo o quadro Bayesiano, é possível definir uma probabilidade condicional entre os eventos θ e y (Equação (7)) (BISHOP, 2006).

$$\pi(\theta|y) = \frac{\pi(y|\theta)\pi(\theta)}{\pi(y)} \quad (7)$$

Desta forma, o teorema de Bayes nos permite avaliar a incerteza em θ depois de ter observado y na forma da probabilidade a posteriori, $\pi(\theta|y)$ e $\pi(\cdot)$ é a probabilidade a priori.

Na Equação (7) $\pi(y|\theta)$ é avaliada para o conjunto de dados observados y e pode ser vista como uma função do vetor de θ , caso em que é chamada de função de verossimilhança. Ela expressa o quão provável é o conjunto de dados observado para diferentes configurações do vetor de θ .

3.3 Distribuição de Probabilidade

Até o momento foi definido o conceito de *evento* para expressar os resultados de experimentos aleatórios, porém essa definição é muito geral. Desta forma, será introduzido o conceito de variável aleatória para quantificar numericamente a ocorrência dos eventos.

Considerando uma espaço amostral E , uma variável aleatória θ é definida como uma função entre os elementos do espaço amostral e o espaço dos números reais, ou seja, $\theta: E \rightarrow \mathbb{R}$. O mapeamento entre o espaço dos números reais e o espaço de probabilidades $\pi: \mathbb{R} \rightarrow [0,1]$ é denominado função de probabilidade para variáveis aleatórias discretas e contínuas. Além disso, apresenta diferentes distribuições de acordo com o comportamento das variáveis aleatórias (BISHOP, 2006).

A distribuição de probabilidade deve seguir as condições de normalização, e não assumir valores negativos, como mostra as Equações (8) e (9) (BISHOP, 2006).

$$\pi(\theta_i) \geq 0 \quad i = 1 \dots N, \quad (8)$$

$$\sum_{i=1}^N \pi(\theta_i) = 1 \quad (9)$$

Para o caso no qual as variáveis aleatórias são contínuas, o somatório é substituído pela integral e a Equação (9) se torna a Equação (10).

$$\int_{-\infty}^{\infty} \pi(\theta) d\theta = 1 \quad (10)$$

Uma das operações mais importantes envolvendo probabilidade é a de encontrar médias ponderadas de funções. O valor médio de alguma função $f(\theta)$ (determina uma sequência de variáveis aleatórias) sob uma distribuição de probabilidade $\pi(\theta)$ é chamado de valor esperado ou esperança matemática, denotado por $E[f]$. A Equação (11) é dada para o caso de distribuição discreta (BISHOP, 2006).

$$E[f] = \sum_{\theta} \pi(\theta) f(\theta) \quad (11)$$

A média é ponderada pelas probabilidades relativas dos diferentes valores de θ . No caso de variáveis contínuas, as esperanças são expressas em termos de uma integração em relação à densidade de probabilidade, dada pela Equação (12) (BISHOP, 2006).

$$E[f] = \int_{-\infty}^{\infty} \pi(\theta) f(\theta) d\theta \quad (12)$$

3.4 Distribuição Normal

A distribuição normal também é conhecida como distribuição Gaussiana, sendo uma das distribuições de probabilidade mais utilizadas para modelar fenômenos naturais. A Equação (13) defini a função de densidade de probabilidade para o caso de uma única variável θ de valor real (BISHOP, 2006).

$$N(\theta | \mu, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(\theta-\mu)^2} \quad (13)$$

Que é governada por dois parâmetros: μ , chamado de média e σ^2 de variância. A raiz quadrada da variância é chamada de desvio padrão, σ (BISHOP, 2006). A Figura 1 mostra o gráfico da distribuição Gaussiana.

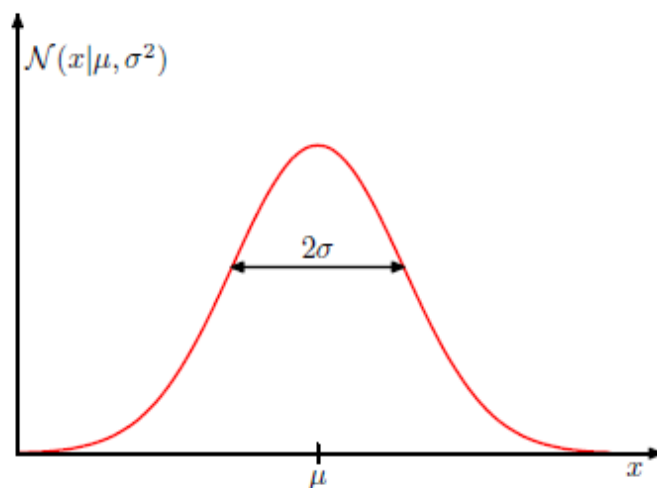


Figura 1 – Distribuição normal. Fonte: (BISHOP, 2006).

3.5 Comentários Finais

Neste capítulo foram apresentados conceitos básicos para melhor entendimento do leitor para a próxima seção. Enfatizando as interpretações de probabilidade, ou seja, uma análise de vários conceitos e definições. Após o estudo desta em termos clássico e frequentista, o matemático Thomas Bayes desenvolveu a probabilidade Bayesiana, que fornece uma quantificação para a ocorrência de um evento. Com essa nova definição surgiu o teorema de Bayes. Sendo este muito importante para a base e entendimento dos métodos que serão descritos no capítulo 4. Além disso, foi estudada a distribuição normal, que depende de dois parâmetros (média e desvio padrão).

4 MÉTODOS DE MONTE CARLO SEQUENCIAL

Os métodos de Monte Carlo Sequencial (SMC - *Sequential Monte Carlo Methods*) são uma classe eficiente de algoritmos para gerar amostras proveniente de uma distribuição de probabilidade de interesse. Estes métodos são muito flexíveis, fáceis de implementar e aplicáveis em diversas áreas. Seus respectivos algoritmos, chamados de filtros de partículas (PF), são usados para lidar com a intratabilidade computacional de modelos gerais de espaço de estado (MARQUES; STORVIK, 2013). Através de um conjunto de dados (amostras), os métodos SMC são capazes de prever uma variável desconhecida. Nestes casos, geralmente é necessário que estes dados ou observações sejam gerados em tempo real, assim como a estimação (VALLE, 2005).

Existem diferentes versões de filtro de partículas baseados em aceitação-rejeição, como Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC) e amostragem por importância. Os filtros apresentados neste capítulo são baseados em amostragem por importância (VALLE, 2005).

Neste capítulo, são apresentados alguns conceitos para o entendimento dos filtros de partículas, sendo estes: Processos Estocásticos, Método de Simulação, Problema de Estimação de Estado, Reamostragem movel e Filtro de Partículas Aceleração-Reponderação (*Particle Filter Move-Reweighting*).

4.1 Processos Estocásticos

Processos estocásticos podem descrever vários fenômenos físicos devido a sua capacidade de simular ruídos e outras incertezas intrinsecamente presentes nas observações dos fenômenos que ocorrem na natureza, tais como processos de difusão, comportamento microscópico da matéria, análise de sinais eletromagnéticos, entre outros (BISHOP, 2006, MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015). Esses são definidos como um conjunto de variáveis aleatórias $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_t$ indexadas em função do tempo, e podem ser classificadas como:

- Processo estocástico discreto: Quando a variável t , que representa o tempo, assume apenas valores discretos, ou seja, o conjunto de variáveis aleatórias

pode ser escrito como $(\theta_t | t \in T)$, no qual $T \in \mathbb{N}^+$. Nesse caso, o processo estocástico também é chamado de cadeia.

- Processo estocástico contínuo: Quando a variável t assume valores contínuos, ou ainda, quando o conjunto de variáveis aleatórias é definido como $(\theta(t) | t \in T)$, no qual $T \in \mathbb{R}^+$.

4.1.1 Monte Carlo via Cadeias de Markov

Monte Carlo via Cadeias de Markov (*Markov chain Monte Carlo* - MCMC) são métodos baseados em Cadeias de Markov, na qual a distribuição estacionária do processo estocástico é a distribuição *a posteriori* de interesse. Existem diversos tipos de métodos MCMC, dentre estes, o Algoritmo de Metropolis-Hastings e Algoritmo (Amostrador) de Gibbs que são os mais utilizados (BISHOP, 2006, MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015).

Este métodos fazem uso do método de Monte Carlo para estimar o valor esperado de uma variável aleatória θ_t ou função de variável aleatória $f(\theta_t)$, através de uma amostra da distribuição da probabilidade de $\pi(\theta_t)$. Esse conjunto amostral da distribuição de probabilidade é gerado iterativamente através de um processo estocástico Markoviano discreto, ou uma cadeia de Markov (BISHOP, 2006, MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015, OLIVEIRA, 2008).

Quando a distribuição de probabilidade $\pi(\theta_t)$ não pode ser calculada diretamente esse método é então utilizado. Isso é devido ao elevado custo computacional necessário para efetuar os cálculos em todo o domínio da distribuição ou pela falta de conhecimento prévio de sua parametrização. Portanto, estes métodos são muito flexíveis, fáceis de implementar e aplicáveis em diversas áreas (BISHOP, 2006, MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015, OLIVEIRA, 2008).

Como foi visto na Seção 3.3, o valor esperado de uma variável $\theta(t)$ que segue uma distribuição de probabilidade $\pi(\theta(t))$, pode ser definido segundo a Equação (14) (BISHOP, 2006, MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015, OLIVEIRA, 2008).

$$E[\theta(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) \pi(\theta(t)) d\theta \quad (14)$$

Porém, quando não é possível determinar $\pi(\theta)$ diretamente, podemos estimar o valor esperado através de uma amostra da distribuição de probabilidade formada pelo conjunto discreto de variáveis aleatórias independentes $\theta_t^{(1)}, \theta_t^{(2)}, \dots, \theta_t^{(L)}$, assim aproximar o valor estimado através do método de Monte Carlo (Equação (15)) (BISHOP, 2006, MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015, OLIVEIRA, 2008).

$$E[\theta_t] = \sum_{l=1}^L \theta_t^l \pi(\theta_t^l) \quad (15)$$

No MCMC a geração do conjunto de variáveis aleatórias é realizado iterativamente através de uma cadeia de Markov, ou seja, considerando $\theta_t^{(l)}$ como sendo o estado atual de uma das variáveis do conjunto amostral, um novo estado $\theta_{t+1}^{(l)}$ será gerado utilizando uma distribuição de probabilidade proposta q , dada pela Equação (16) (BISHOP, 2006, MIGON; GAMERMAN; LOUZADA, 2015, OLIVEIRA, 2008).

$$\theta_{t+1}^l \sim q(\theta_{t+1}^l | \theta_t^l) \quad (16)$$

4.1.2 Inferência Bayesiana

A inferência bayesiana é um procedimento geral para a construção de uma distribuição de probabilidade (*a posteriori*) para as quantidades de interesse a partir de medidas dadas pela distribuição de probabilidade (*a priori*) para todos os parâmetros incertos, ou seja, todas as formas de incerteza são expressas em termos de probabilidade (SCHMIDT; GEORGE; WOOD, 1999).

Segundo Migon, Gamerman e Louzada (2015) a inferência bayesiana é o processo de ajustar um modelo de probabilidade a um conjunto de dados e resumir o resultado por uma distribuição de probabilidade nos parâmetros do modelo e em quantidades não observadas, tais como previsões para novas observações.

A teoria da inversão estatística tem como objetivo extrair informações e avaliar a incerteza sobre as variáveis com base em todos os conhecimentos disponíveis do processo de medição, bem como informações e modelos das incógnitas que estão disponíveis antes da medição. A filosofia por trás dos métodos de inversão estatística é reformular o problema inverso na forma estatística para se obter informações (KAPIO; SOMERSALO, 2004). Sendo assim, a inversão estatística está baseada nos seguintes princípios:

- i. Todas as variáveis incluídas no modelo são modeladas como variáveis aleatórias;
- ii. A aleatoriedade descreve nosso grau de informação acerca dessas realizações;
- iii. Os graus de informação referente a estes valores são codificados através de distribuições de probabilidade;
- iv. A solução do problema inverso é a distribuição *a posteriori*.

Com estas considerações, o ponto de partida para inferência bayesiana é a regra de probabilidade de Bayes (SCHMIDT; GEORGE; WOOD, 1999, COSTA, 2015), dada pela Equação (17).

$$\pi(\theta, y) = \pi(\theta|y)\pi(y) \quad (17)$$

sendo, $\pi(\theta, y)$ é a distribuição de probabilidade conjunta para as quantidades θ e y , $\pi(\theta|y)$ é a distribuição de probabilidade condicional de θ dado y , e $\pi(y)$ é a distribuição de probabilidade marginal de y . A distribuição $\pi(y)$ pode ser obtida integrando a $\pi(\theta, y)$, como mostra a Equação (18).

$$\pi(y) = \int \pi(\theta, y) d\theta \quad (18)$$

Se θ representa parâmetros sobre os quais desejamos estudar e y representa o comportamento dos dados sobre θ , então a probabilidade de θ dado y pode ser construída a partir do Teorema de Bayes, de acordo com a Equação (7) (7).

As técnicas Bayesianas têm sido amplamente implementadas para solução de diversos problemas e utiliza diferentes algoritmos para o cálculo da função densidade de probabilidade *a posteriori* $\pi(\theta|y)$.

A inferência Bayesiana não faz distinção entre variáveis aleatórias e os parâmetros de um modelo: todos são considerados quantidades aleatórias. Para resolver o Teorema de Bayes, dado pela Equação (7), o cálculo computacional do termo do denominador é difícil e usualmente não é necessário para cálculos práticos, sendo visto como uma constante de marginalização (VALLE, 2005). Desta forma, para aproximar a distribuição *a posteriori* (Equação (7)), usa-se frequentemente métodos determinísticos e estocásticos, como integração pelo método de Monte Carlo. Portanto, o Teorema de Bayes pode ser escrito pela Equação (19).

$$\pi(\theta|y) \propto \pi(y|\theta)\pi(\theta) \quad (19)$$

4.1.3 Integração por Monte Carlo

O método de integração de Monte Carlo é utilizado para aproximar integrais estatística que não possuem solução analítica. Suponha que o interesse esteja na esperança da distribuição *a posteriori* de uma função $g(\theta)$ dada pela Equação (20).

$$E[g(\theta)|y] = \int_{\theta} g(\theta|y)\pi(\theta)d\theta \quad (20)$$

A integral (Equação (20)) pode ser aproximada gerando amostras $\theta^{(i)}, i=1, \dots, M$ da distribuição $\pi(\theta|y)$ e calculando a média amostral (Equação (21)).

$$\bar{g}_M \approx \frac{1}{M} \sum_i g(\theta^{(i)}) \quad (21)$$

Tem-se que \bar{g}_M converge quase certamente para $E[g(\theta)|y]$ pela Lei Forte dos Grandes Números (BREIMAN, 1992 *apud* SILVA, 2012).

4.2 Métodos de Simulação

Os métodos de simulação são utilizados para extrair amostras de uma densidade que é difícil de se amostrar. Estes métodos são aceitação-rejeição (A-R), amostragem por importância (IS) e amostragem por importância e reamostragem sequencial (SIR) (será abordado na Seção 4.3.1). O objetivo de cada método é extrair uma amostra do núcleo da distribuição π .

4.2.1 Aceitação-Rejeição

O método de A-R está diretamente ligado ao método SIR. Entretanto, a diferença entre este e o SIR, é que A-R produz amostras independentes e identicamente distribuídas da distribuição $\pi(\theta)$ e não uma amostra aproximada (VALLE, 2005).

Este método requer a especificação de uma densidade $q(\theta)$, conhecida como densidade de proposta ou de importância, da qual seja simples de se amostrar. Seja $w(\theta) = \pi(\theta)/q(\theta)$, a escolha de $q(\theta)$ é feita de forma que $\pi(\theta) \leq cq(\theta)$ para todo θ , na qual $c > 0$ é uma constante conhecida. Maiores detalhes são apresentados por Ripley (1987) e Valle (2005).

4.2.2 Amostragem por Importância

Para o cálculo das estimativas da Equação (20), que geralmente é complicado para problemas não-lineares e não gaussianos, é utilizado o método IS. Este método foi introduzido por Kloek e Van Dijk (KLOEK; DIJK, 1978 *apud* VALLE, 2005). A ideia chave é utilizar uma densidade de importância conhecida $q(\theta|y)$, a qual se relaciona com a distribuição $\pi(\theta|y)$ através do peso de importância dado na Equação (22).

$$w(\theta) = \frac{\pi(\theta|y)}{q(\theta|y)} \quad (22)$$

Desta forma, tem-se a Equação (23).

$$E(g(\theta)|y) = \int_{\theta} g(\theta) \frac{\pi(\theta|y)}{q(\theta|y)} q(\theta|y) d\theta = \int_{\theta} g(\theta) w(\theta) q(\theta|y) d\theta \quad (23)$$

A Equação (23) pode ser calculada pela aproximação abordada pela Equação (24).

$$E(g(\theta)|y) \approx \frac{1}{M} \sum_i g(\theta^{(i)}) w(\theta^{(i)}) \quad (24)$$

O método IS funciona bem quando a função $q(\theta|y)$ é uma boa aproximação da função objetivo, isto é, quando as ponderações de $w(\theta)$ são próximos de 1. Nas caudas da distribuição, nem sempre isto pode ser possível (VALLE, 2005).

4.3 Problema de Estimação de Estado

A modelagem a ser utilizada para representar tanto a observação/medida quanto a evolução dos estados é um dos temas em problemas de estimação de estados. Esta modelagem é representada pelo espaço de estados de sistemas dinâmicos, contemplando o modelo de evolução de estados junto com o modelo de observação. Os métodos para solução de problemas de estimativa de estado partem do pressuposto de estimar as variáveis de estado baseado na informação de alguma variável que possa ser medida e um modelo estocástico de evolução dessas variáveis (CHEN; MORRIS; MARTIN 2005, KAPIO; SOMERSALO, 2004, ARULAMPALAM *et al.*, 2002).

Considere o seguinte modelo de evolução (Equação (25)) para um problema de estimativa de estado.

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{v}_{k-1}) \quad (25)$$

o vetor $\mathbf{x} \in R^{n_x}$ é o vetor de estado que contém todas as variáveis que serão estimadas dinamicamente. O subscrito $k = 1, 2, \dots$, representa o instante de tempo t , \mathbf{f} é uma função não linear das variáveis de estado \mathbf{x} e do vetor de incertezas, $\mathbf{v} \in R^{n_v}$, associados a essas variáveis (CHEN; MORRIS; MARTIN 2005, KAIPIO; SOMERSALO, 2004, ARULAMPALAM *et al.*, 2002).

O modelo de observação ou de medidas pode ser dado pela Equação (26).

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{h}(\mathbf{x}_k, \mathbf{n}_k) \quad (26)$$

As medidas são representadas por $\mathbf{z} \in R^{n_z}$ e o vetor $\mathbf{n} \in R^{n_n}$ o ruído das medidas. O objetivo da estimação de estado é calcular sequencialmente o vetor de estado \mathbf{x}_k , dada as medições \mathbf{z}_k , apoiado nas seguintes suposições (KAIPIO; SOMERSALO, 2004):

- (i) A sequência \mathbf{x}_k para $k = 1, 2, \dots$, é um processo Markoviano de primeira ordem (a probabilidade de um estado depende apenas do estado imediatamente anterior), como mostra a Equação (27).

$$\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1}) = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}) \quad (27)$$

- (ii) A sequência \mathbf{z}_k para $k = 1, 2, \dots$, é um processo Markoviano com respeito a história de \mathbf{x}_k , como na Equação (28).

$$\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1}) = \pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k) \quad (28)$$

- (iii) A sequência \mathbf{x}_k depende das observações passadas através de sua própria história, ou seja, Equação (29).

$$\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{z}_{1:k-1}) = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k-1}) \quad (29)$$

A expressão $\pi(a|b)$ denota a probabilidade condicional de a dado b . Este postulado pode ser ilustrado (Figura 2) pelo esquema de dependência (ou sistema de vizinhança).

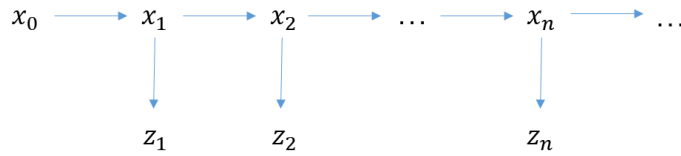


Figura 2 – Esquema de dependência. Fonte: KAPIO e SOMERSALO (2004), modificado pelo autor.

Se as sequências estocásticas \mathbf{x}_k e \mathbf{z}_k , satisfizerem as condições (i) - (iii), descritas acima, chamamos este par de um modelo de evolução-observação (KAPIO; SOMERSALO, 2004).

A capacidade de simular estados aleatórios e avaliar as densidades de transição e de observação são os principais componentes dos algoritmos de filtragem de partículas.

4.3.1 Filtros de Partículas

O método de filtro de partículas é uma técnica de Monte Carlo para a solução de problemas de estimação de estado. A técnica de Monte Carlo é uma abordagem mais geral e robusta para os problemas não-lineares e/ou distribuições não-Gaussiana. A ideia-chave é de representar a função de densidade *a posteriori* de interesse, exigida por um conjunto de amostras aleatórias (partículas) com pesos associados, e calcular as estimativas com base nessas amostras e pesos. À medida que o número de amostras é aumentado, esta caracterização de Monte Carlo torna-se uma representação equivalente da função de probabilidade *a posteriori*, e a solução se aproxima da estimativa ótima bayesiana (KAPIO; SOMERSALO, 2004).

As partículas são os possíveis estados do processo, que podem ser representados como pontos no espaço de estado do processo, isto é, $\mathbf{x}_{0:k}^i, i = 0, 1, \dots, N$, onde N é o número de partículas do sistema. Cada amostra tem seus respectivos pesos definidos como $w_k^i, i = 0, 1, \dots, N$. Considerando o conjunto de todas as variáveis de estado até o instante t_k , $\mathbf{x}_{0:k} = \mathbf{x}_j, j = 0, 1, \dots, k$, e com os pesos normalizados $\sum_{i=1}^N w_k^i = 1$, a distribuição *a posteriori* no instante t_k é aproximada pela Equação (30) (KAPIO; SOMERSALO, 2004).

$$\pi(\mathbf{x}_{0:k} | \mathbf{z}_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^N w_k^i \delta(\mathbf{x}_{0:k} - \mathbf{x}_{0:k}^i) \quad (30)$$

Sendo $\delta(\cdot)$ a função delta Dirac. A Equação (30) pode ser escrita da forma, como mostrado na Equação (31).

$$\pi(\mathbf{x}_{0:k} | \mathbf{z}_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^N w_k^i \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^i) \quad (31)$$

O cálculo dos pesos é definido pela Equação (32) (DOUCET; FREITAS; GORDON, 2001).

$$w_k^i \propto w_{k-1}^i \frac{\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k^i) \pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i)}{q(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k)} \quad (32)$$

sendo $q(\cdot)$ a densidade de importância, que minimiza a variância dos pesos condicionados em \mathbf{x}_{k-1}^i e \mathbf{z}_k , e é dada por $q(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k) = \pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k)$. Como na maioria dos problemas práticos, esta escolha ótima é analiticamente intratável, e alguns casos estariam sujeitos a condições mais restritivas, a densidade de importância é tomada como densidade de transição, isto é, $q(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k) = \pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ (DOUCET; FREITAS; GORDON, 2001). Desta forma, a Equação (32) fica reduzida a Equação (33).

$$w_k^i \propto w_{k-1}^i \pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k^i) \quad (33)$$

Este tipo de filtro de partícula é conhecido como filtro de amostragem por importância sequencial (SIS). A aplicação deste filtro causa o fenômeno de degeneração das partículas, que significa um aumento gradual da variância dos pesos, ou seja, após algumas iterações, apenas uma das partículas tem um peso não desprezível (ARULAMPALAM *et al.*, 2002, KAIPIO; SOMERSALO, 2004, CAPPE; GODSILL; MOULINES, 2007). Uma solução proposta por Gordon; Salmond e Smith (1993) é permitir o rejuvenescimento do conjunto de amostras, replicando as amostras com pesos de alta importância e removendo as amostras com peso baixo. Esta técnica é

chamada de reamostragem. O filtro baseado nesta técnica é conhecido como filtro de amostragem-reamostragem por importância sequencial (SIR).

Uma medida adotada para a degeneração que ocorre no filtro SIS, é o tamanho efetivo da amostra N_{eff} introduzido por Kong; Liu e Wong (1994) e estimado através da Equação (34). Valores de N_{eff} pequenos significam uma severa degeneração.

$$\hat{N}_{eff} = \frac{1}{\sum_{i=1}^N (w_k^i)^2} \quad (34)$$

No qual w_k^i são os pesos normalizados.

A Figura 3 apresenta o processo de seleção das partículas através da reamostragem, no qual quatro aspectos são levados em conta. No primeiro, as partículas possuem peso uniforme no instante de tempo $t = t_k$. No segundo, chamado de correção, os pesos das partículas são atualizados após as medidas. O terceiro, mostra que as partículas com menor peso são descartadas e as que tem maior peso são replicadas e dão origem a novas partículas próximas às regiões de maior probabilidade (reamostragem). No quarto aspecto, após a reamostragem as partículas novamente ganham pesos uniformes para o processo de evolução para o instante de tempo $t = t_{k+1}$. Este processo de reamostragem é feito para todos os instantes de tempo t_k .

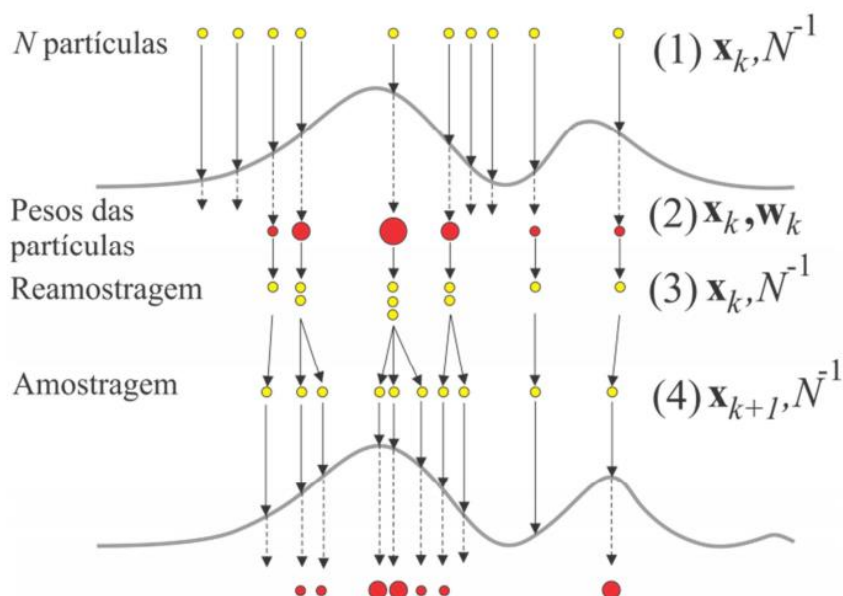


Figura 3 – Reamostragem. Fonte: COSTA (2015).

O filtro de partículas focaliza nas regiões da distribuição onde a verossimilhança é maior, ou seja, as boas aproximações significam maior importância (PINTO, 2007, SILVA, 2012). A técnica de reamostragem pode causar alguns inconvenientes, sendo que o principal problema é quando as amostras com pesos maiores são selecionadas estatisticamente várias vezes. Devido a isso, há uma perda de diversidade amostral, já que a amostra resultante apresenta muitos pontos repetidos. Esse problema é conhecido como empobrecimento amostral. A Tabela 1 descreve o algoritmo SIR.

Tabela 1 – Algoritmo do filtro SIR (SILVA, 2012).

Algoritmo do Filtro de Partícula SIR
1. Inicialização
1.1 Faça $k=1$;
Gere um conjunto de partículas da distribuição inicial $\left(x_k^i\right)=\pi\left(z_k\left x_{k-1}^i\right.\right)$
2. Avaliação dos pesos
Calcule os pesos: $w_k^i=\pi\left(z_k\left x_k^i\right.\right)$;
Normalize os pesos: $\hat{w}_k^i=\frac{w_k^i}{\sum_{i=1}^N w_k^i}$
3. Reamostragem ou Seleção

3.1 Construa a soma dos pesos acumulativos, sendo computada por $c_i = c_{i-1} + \hat{w}_k^i$, para $i = 1, \dots, N$, com $c_0 = 0$;
3.2 Faça $i = 1$ e gere ς_1 de uma distribuição uniforme $U[0, N^{-1}]$;
3.3 Para $j = 1, \dots, N$, faça: $\varsigma_j = \varsigma_1 + N^{-1}(j-1)$; Enquanto $\varsigma_j > c_i$ faça $i = i + 1$; Designe as partículas $x_k^j = x_k^i$; Designe os pesos para $w_k^j = N^{-1}$.
4. Cálculo da Média <i>a posteriori</i> $x_k = \sum_{i=1}^N x_k^i w_k^i$
5. Evolução do modelo
5.1 Faça $k = k + 1$. Se $k = k_{final} + 1$, então pare;
5.2 $x_k^i = \pi(x_k x_{k-1}^i)$ para $i = 1, \dots, N$.
6. Retorne ao Passo 2

4.4 Reamostragem Móvel

Apesar do filtro SIR ser capaz de controlar a variância dos pesos e ser fácil de implementar, a etapa de reamostragem quando utilizada sucessivamente leva ao empobrecimento da amostra através do número de partículas distintas, ou seja, um algoritmo eficiente deve ser capaz de produzir pesos de partículas com baixa variância. Em particular, quando a distribuição alvo difere significativamente a cada tempo, a variância do estimador de Monte Carlo pode ser afetada negativamente. Desta forma, a eficiência dos algoritmos de SMC tende a ser baixa (MARQUES; STORVIK, 2013).

Para reduzir o empobrecimento amostral Gilks e Berzuini (2001) propuseram uma técnica que evita a degeneração observada nos métodos atuais. Os autores sugeriram um novo método para a análise bayesiana, chamado de algoritmo *Resample-Move*

(RM). Este filtro combina reamostragem por importância sequencial (SIR) e iterações de cadeia de Markov. O objetivo é obter uma distribuição evoluindo por periódicos passos de reamostragem e por ocasionais movimentos de cadeias de Markov, que deixam cada partícula individual da posição corrente para uma nova posição aleatória do espaço de parâmetros. Ao contrário dos métodos MCMC padrão, o número de iterações da cadeia é arbitrário e nenhum tempo de *burn-in* é requerido.

Neste método, o núcleo de Markov $K(x_{1:t}^* | x_{1:t})$ com $p(x_{1:t})$ como a distribuição estacionária é projetada para extrair amostras após os passos de reamostragem.

O algoritmo RM no tempo t simplificado pode ser dado pelos seguintes passos:

- i. Executar o filtro de partículas com reamostragem para N novas partículas igualmente ponderadas;
- ii. Move $x_{1:t}^*$ de acordo com o núcleo de transição K invariante em relação a $p(x_{1:t})$;
- iii. Aproximar $p(x_{1:t})$ por $N^{-1} \sum_i \delta_{x_{1:t}^*} (x_{1:t})$.

4.5 Filtro de Partículas Aceleração-Reponderação (*Particle Filter Move-Reweighting*)

Marques e Storvik (2013) introduziram uma abordagem de reponderação das partículas depois do passo móvel. A proposta dos autores foi executar este passo antes da reamostragem, seguida pela atualização dos pesos. Alguns tipos de atualizações podem gerar amostras devidamente ponderadas e a escolha adequada dessas atualizações resulta em menor variabilidade dos pesos das partículas. Isso pode acarretar o atraso da reamostragem e melhor desempenho do algoritmo.

4.5.1 Passo móvel com núcleos MCMC

Assumindo que $x_{1:t} \sim q(x_{1:t})$ é seguido por um movimento de $x_{1:t}^* \sim K(x_{1:t}^* | x_{1:t})$ onde K é invariante em relação a $p(x_{1:t})$. De acordo com o trabalho de Marques e Storvik

(2013) a definição da distribuição alvo pretendida é dada por $\bar{p}(x_{1:t}^*, x_{1:t}) \equiv p(x_{1:t}^*) h(x_{1:t} | x_{1:t}^*)$, no qual $h(x_{1:t} | x_{1:t}^*)$ é uma densidade núcleo que integra no conjunto de χ_t . Marques e Storvik (2013) obtiveram o seguinte resultado através da Equação (35), após algumas considerações.

$$w_t^{*i} \equiv w_t^* \left(x_{1:t}^i; x_{1:t}^{*i} \right) = w_t^i \times r_t^i \quad (35)$$

Sendo r_t^i obtido pela Equação (36).

$$r_t^i \equiv r_t \left(x_{1:t}^i; x_{1:t}^{*i} \right) = \frac{p(x_{1:t}^{*i}) h(x_{1:t}^i | x_{1:t}^{*i})}{p(x_{1:t}^i) K(x_{1:t}^{*i} | x_{1:t}^i)} \quad (36)$$

Ao adicionar o passo móvel e atualizar os pesos das partículas, tem-se que, para qualquer densidade h , w_t^* é um peso adequado para $x_{1:t}^*$ em relação $p(x_{1:t})$. O ponto principal deste esquema de amostragem é destacar várias opções de funções pesos adequados $w_t^* \left(x_{1:t}; x_{1:t}^* \right)$ para qualquer núcleo K dado, em que existe flexibilidade na escolha de h (MARQUES; STORVIK, 2013). Além disso, no passo móvel, cada uma das cópias geradas é movida de acordo com o núcleo K , condicionalmente independente de cada outra sobre o conjunto de $x_{1:t}^*$. Espera-se que após várias iterações as partículas $x_{1:t}$ se localizem em regiões de alta probabilidade, sendo portanto, uma aproximação eficiente.

O termo estocástico r_t é visto como um termo de correção dinâmica que tende a reequilibrar os pesos das partículas após o passo móvel. Ao atualizar os pesos Marques e Storvik (2013) apresentaram uma possibilidade adicional para reduzir os casos em que a distribuição dos pesos é extremamente distorcida. Através do passo móvel, $x_{1:t}^*$ está mais próximo da distribuição alvo do que $x_{1:t}$, sendo assim, o peso

também deve ser atualizado mais perto de $1/N$.

O método aceleração-reponderação é uma combinação do método de amostragem SMC e MCMC, no qual a complexidade computacional se compara com o algoritmo AR. Percebe-se que após atualizar os pesos das partículas o problema de degeneração permanece, e o estágio de reamostragem nestes casos faz-se

necessários. Para reduzir o uso do passo de reamostragem é essencial a escolha inteligente de passo móvel e esquemas de atualização de peso. A Tabela 2 descreve o algoritmo descrito pelos autores Marques e Storvik (2013).

Tabela 2 - Filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC (MARQUES; STORVIK, 2013).

Algoritmo do filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC
No tempo t faça;
Propagação normal como no SMC;
Mova x_t^{*i} através de um núcleo p invariante MCMC, $K\left(x_t^{*i} x_t^i\right)$;
Atualizar e normalizar os pesos $w_t^{*i} \propto w_t^i \times r_t^i$ onde
$r_t^i = \frac{p\left(x_{1:t}^{*i}\right) h\left(x_{1:t}^i x_{1:t}^{*i}\right)}{p\left(x_{1:t}^i\right) K\left(x_{1:t}^{*i} x_{1:t}^i\right)}$
Se o tamanho efetivo da amostra for pequeno então
Reamostrar para obter N novas partícula igualmente ponderadas.

Nos casos em que o uso do núcleo MCMC é difícil, passos alternativos podem ser considerados. Para essas circunstâncias, primeiramente amostramos partículas de uma proposta $x_{1:t} \sim q(\cdot)$, seguido de um núcleo de transição arbitrário, isto é, $x_{1:t}^* \sim Q(\cdot | x_{1:t})$. Para todo x , o núcleo de transição Q especifica uma distribuição de probabilidade sobre o espaço Ω_t , e assim descreve uma maneira de mover de um dado ponto x de Ω_t a um novo ponto z do mesmo espaço (MARQUES; STORVIK, 2013). Assim a Equação (36) assume a forma (Equação (37)).

$$r_t^i \equiv r_t \left(x_{1:t}^i; x_{1:t}^{*i} \right) = \frac{p \left(x_{1:t}^{*i} \right) h \left(x_{1:t}^i \middle| x_{1:t}^{*i} \right)}{p \left(x_{1:t}^i \right) Q \left(x_{1:t}^{*i} \middle| x_{1:t}^i \right)} \quad (37)$$

Quando um núcleo MCMC não está disponível, o uso de algum núcleo de transição arbitrário Q para o passo móvel e reponderação da partícula pode ser atraente. A escolha de Q pode, por exemplo, ser uma aproximação do núcleo MCMC ou uma proposta inteligente, levando em conta que têm-se amostras geradas a partir de q como partículas auxiliares. Desta forma, o Q pode ser escolhido como uma das propostas de Langevin, tal como a Equação (38) (MARQUES; STORVIK, 2013).

$$Q \left(x_{1:t}^{*i} \middle| \cdot \right) = N_p \left(x_{1:t}^{*i} \middle| x_{1:t} + \frac{\sigma_t^2}{2} dp, \sigma_t^2 \mathbf{I}_p \right) \quad (38)$$

sendo σ_t um parâmetro de ajuste e dp é a derivada da distribuição alvo não normalizada.

4.6 Comentários Finais

Neste capítulo foram apresentados os métodos de Monte Carlo, que são muito flexíveis, fáceis de implementar e aplicáveis em diversas áreas. Seus algoritmos são conhecidos como filtros de partículas, os quais envolvem o uso de um sistema de n partículas que evoluem de acordo com um processo de Markov.

Os filtros abordados neste trabalho foram os filtros SIR e AR. Como mencionado na seção 4.3.1, o filtro SIR foi criado para solucionar o problema de degeneração das partículas. Para tal, os autores Gordon, Salmond e Smith (1993) desenvolveram a técnica de reamostragem. Entretanto, essa técnica possuiu um ponto fraco, que é o empobrecimento amostral. Para solucionar este inconveniente, alguns autores sugeriram novos métodos de filtro de partículas, tais como o filtro ASIR e o AR. O filtro AR combina reamostragem por importância sequencial (SIR) e iterações de cadeia de Markov.

As vantagens destes métodos são que não precisam linearizar os modelos, e nem requerem que as incertezas sejam modeladas por distribuições normais, possuem facilidade de implementação, modularidade (basta atualizar a densidade por importância e o peso por importância), a etapa de reamostragem independe da complexidade do modelo e não demanda nenhuma alteração. Por outro lado, possuem alto custo computacional, dificuldade de determinar o número ótimo de partículas e o número de partículas cresce conforme o aumento da dimensão do modelo. Além disso, no filtro AR existe a dificuldade de encontrar a melhor forma de calcular o gradiente para núcleo de transição arbitrário Q .

5 METODOLOGIA

Este capítulo irá abordar a simulação dos modelos de Buckley-Leverett e van der Vusse, com o auxílio do método de diferenças finitas. Posteriormente serão estimados os parâmetros de cada modelo pelo método de estimação de estados, via filtro de partículas, discutido no capítulo anterior, a partir dos dados obtidos pela simulação do problema direto. Vale ressaltar que um problema direto é um modelo determinístico, no qual os parâmetros do modelo, por exemplo as propriedades físicas, são conhecidos. Ele pode ser usado para prever resultados futuros do comportamento do sistema. Os problemas futuros geralmente consistem em sistemas de equações diferenciais com certas condições de contorno e inicial (HEIMHUBER, 2012).

5.1 Caso 1

Modelos de simulação de reservatórios são usados tanto no desenvolvimento de novos campos quanto em campos desenvolvidos onde as previsões de produção são necessárias para as decisões de investimento. Ao simular um reservatório deve-se ter em conta os processos físicos e químicos que ocorrem na subsuperfície. As propriedades da rocha e do fluido são cruciais quando se descreve o fluxo em meios porosos (HANEA; GHEORGHE, 2011).

O modelo de Buckley-Leverett é utilizado para um escoamento bifásico em um meio poroso. Uma aplicação desse tipo de escoamento é a simulação de reservatório de petróleo. A modelagem proposta por Buckley e Leverett consiste em um modelo simples para a simulação do reservatório de petróleo, sendo o fluxo de água e óleo dados por expressões que só dependem da saturação do fluido (saturação do fluido é o percentual do volume poroso ocupado por cada fase, podendo estas fases ser, gás, óleo e água). Este modelo despreza os efeitos da gravidade e de capilaridade para um escoamento incompressível e bifásico de óleo e água em um meio poroso rígido (BUCKLEY; LEVERETT, 1942, LEVEQUE, 2004).

A equação diferencial parcial do modelo é constituída pelas equações de conservação de massa das fases, óleo e água, juntamente com a Lei de Darcy. Este modelo é considerado unidimensional com fluxos de duas fases saturadas por água e óleo, fluidos incompressíveis e imiscíveis (BUCKLEY; LEVERETT, 1942, LEVEQUE, 2004).

Além disso, os autores consideram um modelo não-linear para o fluxo fracionário. Assim, a equação de conservação de massa da fase água se reduz a uma lei de conservação hiperbólica não-linear. Segundo Buckley e Leverett (1942), a Equação (39) foi formulada para estudar o deslocamento da frente de água durante o processo de recuperação secundária de petróleo.

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{q_T}{\phi} \frac{\partial f}{\partial x} \quad (39)$$

sendo S a saturação do fluido deslocado, q_T o fluxo total, ϕ a porosidade, f a função de fluxo fracionado, t o tempo e x a variável espacial.

O fluxo fracionado da Equação (39) é dado pelo modelo de Stone (1970), obtido pela Equação (40).

$$f(S) = \frac{S^2}{S^2 + \frac{\mu_w}{\mu_o}(1-S)^2} \quad (40)$$

μ_w é a viscosidade da fase molhante e μ_o é a viscosidade da fase não-molhante.

5.1.1 Problema Direto

A formulação matemática do problema físico ou também chamado de problema direto de reservatório de petróleo, dado pelos autores Buckley e Leverett (1942), foi aplicado diferenças finitas centrais para discretização da variável x , e para a integração no tempo, foi utilizada a ferramenta *ode15s* do software MATLAB, como feito por Hoffmann (2014). Sendo assim, o objetivo do problema direto foi a determinação da saturação de água, sendo conhecido a saturação inicial e as propriedades que são consideradas no modelo, como foi mostrada nas Equações (39) e (40)

Para a simulação em uma dimensão (1D) usou-se a razão entre as viscosidades das fases um valor de $\mu_w/\mu_o = 0,5$, a porosidade $\phi = 0,3$ e o fluxo total $q_T = 0,5$.

As condições iniciais e de contorno consideradas neste trabalho são dadas pelas Equações (41) e (42).

$$S(x,0) = \begin{cases} 1, & x \leq 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases} \quad (41)$$

$$S(0,t) = 0 \quad (42)$$

5.1.2 Problema Inverso

Uma tarefa comum na engenharia de reservatórios é fazer previsões sobre o futuro e comportamento e desempenho de reservatórios e de poços instalados, por exemplo as taxas de produção. Isto requer trazer um modelo de simulação (numérico) em correspondência com o reservatório real e as suas propriedades tão boas quanto possíveis, por exemplo, ajustando os parâmetros do modelo, condições de contorno e condições iniciais de forma que o modelo combine os dados observados como os dados reais do reservatório. Uma abordagem amplamente utilizada para este desafio é a correspondência histórica. O procedimento é tudo, menos simples. "A correspondência histórica é tanto arte quanto ciência" (FANCHI, 2005, apud HEIMHUBER, 2012).

Como não há dados reais, o modelo foi usado para gerar dados sintéticos. Este mesmo modelo foi empregado para resolver o problema inverso. Assim, para evitar o crime inverso, adotou-se uma malha não refinada para a estimação.

O problema inverso estudado nesse caso tem como objetivo estimar a saturação da água de um reservatório de petróleo. Desta forma, foram utilizados os filtros SIR e AR. Na solução destes problemas, todas as outras quantidades existentes na formulação matemática do problema físico são consideradas conhecidas, porém as medidas de saturação foram acrescentadas um ruído de 15% da saturação máxima obtida através do modelo direto. Assim, a saturação medida simulada foi gerada com um desvio padrão constante, caracterizando incertezas provenientes do sistema de medidas, como mostra a Equação (43).

$$\mathbf{z} = \mathbf{S}(\mathbf{x}) + \varphi\sigma \quad (43)$$

\mathbf{z} representa as medidas simuladas da saturação contendo erros randômicos, caracterizando as incertezas de medida. $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ representa as medidas exatas a partir do problema direto, φ é uma variável randômica com distribuição normal, média zero e desvio padrão unitário. Esta variável foi gerada pela função *randn* do MATLAB e σ é desvio padrão conhecido, que representa a incerteza da medida.

A função de verossimilhança é representada por $(\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x}))$ na abordagem bayesiana e é dada pela Equação (44) (KAPIO; SOMERSALO, 2004, SILVA, 2012).

$$\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = (2\pi)^{-1/2} |\sigma|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{z} - \mathbf{x})^2\right) \quad (44)$$

Na qual \mathbf{z} são as medidas experimentais, \mathbf{x} são os parâmetros de interesse, sendo esse a saturação, e σ é o desvio padrão das medidas. A Tabela 3 mostra a adaptação feita para a estimação do filtro SIR.

Tabela 3 - Algoritmo do filtro SIR para o problema de reservatório de petróleo.

Algoritmo do Filtro de Partícula SIR
1. Inicialização
1.1 Faça $k=1$;
Gere um conjunto de partículas da distribuição inicial $S_k^i = S(k-1) + \sigma_S \varphi$
2. Avaliação dos pesos
Calcule os pesos: $w_k^i = \pi(z_k S_k^i) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_S^2} (z_k - S_k^i)^2\right)$;
Normalize os pesos: $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{\sum_{i=1}^N w_k^i}$
3. Reamostragem ou Seleção
3.1 Construa a soma dos pesos acumulativos, sendo computada por $c_i = c_{i-1} + \hat{w}_k^i$, para $i = 1, \dots, N$, com $c_0 = 0$;
3.2 Faça $i = 1$ e gere ς_1 de uma distribuição uniforme $U[0, N^{-1}]$;
3.3 Para $j = 1, \dots, N$, faça:
$\varsigma_j = \varsigma_1 + N^{-1}(j-1)$;

Enquanto $\varsigma_j > c_i$ faça $i = i + 1$;
Designa as partículas $S_k^j = S_k^i$;
Designa os pesos para $w_k^j = N^{-1}$.
4. Cálculo da Média <i>a posteriori</i>
$S_k = \sum_{i=1}^N S_k^i w_k^i$
5. Evolução do modelo
5.1 Faça $k = k + 1$. Se $k = k_{final} + 1$, então pare;
5.2 $S_k^i = S(k-1) + \sigma_S \varphi$ para $i = 1, \dots, N$.
6. Retorne ao Passo 2

O método Aceleração-Reponderação é uma combinação do método de amostragem SMC e passos do MCMC. Esse filtro tem como objetivo diminuir a reamostragem das partículas. Para tal, os autores Marques e Storvik (2013) propuseram uma nova abordagem para o cálculo dos pesos, através do termo estocástico r_t , que é visto como um termo de correção dinâmica que tende a reequilibrar os pesos das partículas após o passo móvel, esse foi dado pela Equação (37)). O dp , tem como função direcionar as partículas para as regiões de alta probabilidade de ocorrência, ou seja, percorrendo um espaço contínuo eficientemente, o que acelera a convergência da cadeia de Markov. Além de delimitar a variação que as novas partículas poderão percorrer no espaço delimitado.

A derivada foi calculada com base na distribuição normal, como mostra a Equação (45) e como sugerido no trabalho de Marques e Storvik (2013). Existem várias possibilidades de se calcular o dp , porém alguns métodos podem ser computacionalmente inviáveis e complexos, o que pode tornar a convergência da cadeia de Markov lenta.

$$dp = \frac{d}{dx} \exp^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}_t - \mathbf{x}_t)^2} \exp^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t - \sigma \mathbf{x}_{t-1})^2} \quad (45)$$

Na qual, \mathbf{y}_t é o vetor das medidas simuladas, \mathbf{x}_t são os estados e σ é o desvio padrão das medidas. A Tabela 4 mostra a adaptação feita para a estimação do filtro AR.

Tabela 4 - Filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC.

Algoritmo do filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC
No tempo t faça;
Propagação normal como no SMC;
Mova S_t^{*i} através de um núcleo p invariante MCMC, $Q(S_t^{*i} S_t^i)$;
Atualizar e normalizar os pesos $w_t^{*i} \propto w_t^i \times r_t^i$ onde
$r_t^i = \frac{p(S_{1:t}^{*i})h(S_{1:t}^i S_{1:t}^{*i})}{p(S_{1:t}^i)Q(S_{1:t}^{*i} S_{1:t}^i)}$
Se o tamanho efetivo da amostra for pequeno então
Reamostrar para obter N novas partícula igualmente ponderadas.

5.2 Caso 2

Por razões econômicas e de engenharia, é frequentemente desejável operar reatores químicos de tal modo que a produção de um produto desejado seja maximizada. Para tal, considera-se um reator com ponto de funcionamento em que se obtém um rendimento ótimo em relação ao produto desejado. Estudos são feitos com esse objetivo para investigar e propor as melhores condições de operação do processo em questão. Alguns autores sugerem o uso de estimação juntamente com controle, afim de se obter esses dados (KUNTANAPREEDA; MARUSAK, 2012).

O sistema de reação de van der Vusse é um problema bem conhecido, chamado de *benchmark*. van der Vusse (1964) ilustrou as dificuldades de escolha entre um reator de fluxo pistonado (Plug Flow Reactor - PFR) e um reator de tanque agitado contínuo (Continuous Stirred Tank Reactor - CSTR), com o exemplo mais simples do esquema de reação que envolve uma reação paralela consecutiva e de alta ordem.

Este *benchmark* é muito usado pela comunidade de engenharia de reatores e sistemas de processo, devido ao fato de que o sinal do estado estável (alto valor da matriz de estado) gera mudanças em relação ao ponto operacional (perturbações e *set-points* desejados). Por exemplo, para baixas taxas de fluxo de alimentação, o reator apresenta um comportamento de fase não-mínimo (resposta inversa). Por outro

lado, para altas taxas de fluxo de alimentação, a resposta dinâmica é estável e mostra *overshoot*. Além disso, há um ponto operacional onde a dinâmica zero ocorre. Uma vez que o comportamento do reator se altera, as políticas tradicionais de controle não ajudam na estabilização do reator e no desempenho satisfatório (CHEN; KREMLING; ALLGÖWER, 1995, KUNTANAPREEDA; MARUSAK, 2012). As equações (46) e (47) representam o conjunto de reações químicas envolvendo quatro componentes (A, B, C e D) em arranjos em série e em paralelo. O produto desejado é o componente B, no entanto, através de reações indesejáveis, A também pode ser transformado em D e B em C.



O modelo do reator com uma camisa de arrefecimento, considerando volume e propriedades físicas constantes, compreende o balanço de massa para cada componente e o balanço de energia, dadas pelas Equações (48) - (52).

$$\frac{d}{dt} C_A(t) = \frac{C_{A0} - C_A(t)}{\tau} - r_1 - r_3 \quad (48)$$

$$\frac{d}{dt} C_B(t) = \frac{C_{B0} - C_B(t)}{\tau} + r_1 - r_2 \quad (49)$$

$$\frac{d}{dt} C_C(t) = \frac{C_{C0} - C_C(t)}{\tau} + r_2 \quad (50)$$

$$\frac{d}{dt} C_D(t) = \frac{C_{D0} - C_D(t)}{\tau} + \frac{1}{2} r_3 \quad (51)$$

$$\frac{d}{dt} T(t) = \frac{T_0 - T(t)}{\tau} + \frac{q_r - q}{\rho V c_p} \quad (52)$$

A Equação (53) mostra o balanço de energia no arrefecimento.

$$\frac{d}{dt}T_k(t) = \frac{1}{m_k C_{pk}} \left(\dot{Q}_k + k_w A_R (T(t) - T_k(t)) \right) \quad (53)$$

Nestas equações C_{i0} , $i = A, B, C$ ou D são as concentrações dos componentes na corrente de alimentação, c_p é o calor específico. O tempo de residência é dado por $\tau = V/F$, sendo F a vazão de alimentação e V o volume do reator e r_i , $i = 1, 2$ ou 3 , são as taxas de reação, dadas pelas Equações (54) - (56).

$$r_1 = k_1 C_A(t) \quad (54)$$

$$r_2 = k_2 C_B(t) \quad (55)$$

$$r_3 = k_3 C_A^2(t) \quad (56)$$

As cinéticas de reação são modeladas usando expressões de Arrhenius, como mostra a Equação (57).

$$k_i(T) = k_{i0} \exp\left(\frac{-E_i}{T}\right), \quad i = 1, 2 \text{ ou } 3 \quad (57)$$

A taxa de calor de reação q_r e a taxa de transferência de calor q são dadas pelas Equações (58) e (59).

$$q_r = -(\Delta H_{r1} r_1 + \Delta H_{r2} r_2 + \Delta H_{r3} r_3) V \quad (58)$$

$$q = U A_R [T(t) - T_k(t)] \quad (59)$$

ΔH_{ri} é o calor de reação, U é o coeficiente global de transferência de calor e A_R é a transferência de calor. As concentrações e temperaturas constituem o estado $x(t) = (C_A \ C_B \ C_C \ C_D \ T(t) \ T_k(t))^T$ do sistema dinâmico não-linear descrito pelas Equações (48) - (59). A representação esquemática deste sistema é mostrada na Figura 4.

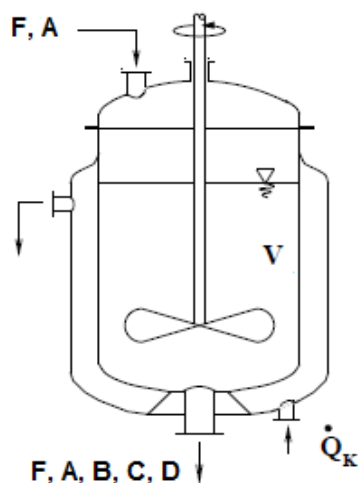


Figura 4 - Representação esquemática de um CSTR. Fonte: CHEN, KREMLING e ALLGÖWER (1995), modificado pelo autor.

5.2.1 Problema direto

Neste caso foi explorado o comportamento da reação de van der Vusse realizada em um reator idealmente agitado com uma camisa de arrefecimento. O sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) dadas pelas Equações (48) - (53) do problema físico de van der Vusse, foi integrado no tempo com o auxílio da rotina *ode15s* e foram obtidos dados das concentrações e temperatura dentro do reator. Para este caso, foram considerados apenas no modelo as concentrações de C_A e C_B , a fim de simplificação do modelo. O valor de todos os parâmetros constantes na reação de van der Vusse e seu estado estacionário (denominado ponto de operação nominal) são dados nas Tabelas 5 e 6, respectivamente (KULIKOV; KULIKOVA, 2014).

Tabela 5 – Coeficientes constantes da reação van der Vusse.

Coeficiente	Valor
k_{10}, k_{20}	$1,287 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$
k_{30}	$9.043 \cdot 10^9 \text{ L}/(\text{h} \cdot \text{mol})$
$E_1/R, E_2/R$	9758,3 K
E_3/R	8560 K
ΔH_{r_1}	4,2 kJ/mol
ΔH_{r_2}	-11,0 kJ/mol
ΔH_{r_3}	-41,85 kJ/mol
ρ	0,9342 kg/L
C_p	3,01 kJ/(kg.K)
k_w	4032 kJ/(h.m ² .K)
A_R	0,215 m ²
V	10 L
m_k	5,0 kg
C_{pk}	2,0 kJ/(kg.K)
F	14,19 L/h
\dot{Q}_k	-1579,5 kJ/h
C_{A0}	5,1 mol/L
T_0	104,9 °C

Tabela 6 - Ponto de operação da reação van der Vusse.

Parâmetros	Valor
C_A	1,278 mol/L
C_B	0,92 mol/L
T	93,59 °C
T_k	104,9 °C

5.2.2 Problema Inverso

Para o caso do problema *benchmark* van der Vusse, a concentração do reagente A e do produto B foram estimadas a partir das medidas simuladas da temperatura do reator. Além disso, tentou-se reduzir o ruído das medidas da temperatura. Para isso, foram utilizados os filtros SIR e AR. Na solução dos problemas inversos, todas as outras quantidades existentes na formulação matemática do problema físico são consideradas conhecidas, porém as medidas de temperatura foram acrescentadas um ruído de 5% da temperatura máxima obtida através do modelo direto, sendo este valor escolhido aleatoriamente.

Como já foi mencionado no caso 1, o modelo foi usado para gerar dados sintéticos. Como este mesmo modelo foi usado para resolver o problema inverso, temos então que evitar o crime inverso. Para tal, usa-se uma malha não refinada a estimação. A Equação (43) foi empregada para gerar a temperatura medida simulada e a Equação (44) para calcular a função de verossimilhança. Os mesmos procedimentos utilizados no caso 1 foram abordados neste caso, porém a diferença deste foi a estimação das concentrações por meio da temperatura do reator, pois essa tem influência nas variações das concentrações. A Tabela 7 mostra a adaptação feita para a estimação do filtro SIR.

Tabela 7 - Algoritmo do filtro SIR para van der Vusse.

Algoritmo do Filtro de Partícula SIR
1. Inicialização
1.1 Faça $k = 1$
Gere um conjunto de partículas da distribuição inicial $T_k^i = T(k-1) + \sigma_T \varphi$ $C_{Ak}^i = C_A(k-1) + \sigma_A \varphi$ $C_{Bk}^i = C_B(k-1) + \sigma_B \varphi$
2. Avaliação dos pesos
Calcule os pesos: $w_k^i = \pi(z_k T_k^i) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_T^2}(z_k - T_k^i)^2\right)$;
Normalize os pesos: $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{\sum_{i=1}^N w_k^i}$

3. Reamostragem ou Seleção
3.1 Construa a soma dos pesos acumulativos, sendo computada por $c_i = c_{i-1} + \hat{w}_k^i$, para $i = 1, \dots, N$, com $c_0 = 0$;
3.2 Faça $i = 1$ e gere ς_1 de uma distribuição uniforme $U[0, N^{-1}]$;
3.3 Para $j = 1, \dots, N$, faça: $\varsigma_j = \varsigma_1 + N^{-1}(j-1)$; Enquanto $\varsigma_j > c_i$ faça $i = i + 1$; Designe as partículas $T_k^j = T_k^i$; $C_{Ak}^j = C_{Ak}^i$, $C_{Bk}^j = C_{Bk}^i$ Designe os pesos para $w_k^j = N^{-1}$.
4. Cálculo da Média <i>a posteriori</i> $T_k = \sum_{i=1}^N T_k^i w_k^i$
5. Evolução do modelo
5.1 Faça $k = k + 1$. Se $k = k_{final} + 1$, então pare;
5.2 $T_k^i = T(k-1) + \sigma_T \varphi$ para $i = 1, \dots, N$. $C_{Ak}^i = C_A(k-1) + \sigma_A \varphi$ para $i = 1, \dots, N$. $C_{Bk}^i = C_B(k-1) + \sigma_B \varphi$ para $i = 1, \dots, N$.
6. Retorne ao Passo 2

A Tabela 8 mostra a adaptação feita para a estimação do filtro AR.

Tabela 8 - Filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC.

Algoritmo do filtro Aceleração-Reponderação com núcleo MCMC
No tempo t faça;
Propagação normal como no SMC;
Mova T_t^{*i} através de um núcleo p invariante MCMC, $Q(T_t^{*i} T_t^i)$;
Atualizar e normalizar os pesos $w_t^{*i} \propto w_t^i \times r_t^i$ onde

$$r_t^i = \frac{p(T_{1:t}^{*i})h(T_{1:t}^i | T_{1:t}^{*i})}{p(T_{1:t}^i)Q(T_{1:t}^{*i} | T_{1:t}^i)}$$

Se o tamanho efetivo da amostra for pequeno **então**

Reamostrar para obter N novas partícula igualmente ponderadas.

5.3 Comentários Finais

Neste capítulo apresentamos a metodologia utilizada para a estimação de estados para o problema de escoamento bifásico e o sistema de reação de van der Vusse. Para cada problema estudado, foi feito um programa para a simulação do processo. A esses resultados foi acrescentado ruídos para a geração das medidas simuladas, posteriormente essas medidas foram utilizadas para estimação.

No próximo capítulo serão discutidos os resultados obtidos de ambos os filtros e analisado o desempenho de cada um.

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesse capítulo são apresentados os resultados dos algoritmos dos filtros de partículas descritos no capítulo 3, para os problemas inversos proposto no capítulo 4. O primeiro caso foi escolhido pois Hoffmann (2014) já havia estudo o filtro SIR para diferentes distribuições para a geração das partículas. Além disso, este problema possui solução analítica e é um problema base para estudo de reservatórios. O segundo caso é um *benchmark* da Engenharia Química, no qual muitos autores buscam estudar as reações de van der Vusse em um reator CSTR para aplicação de controle e estimação.

Sendo assim, os filtros foram aplicados para estimar a saturação, caso 1, e as concentrações de C_A e C_B e diminuir o ruído da temperatura do reator, caso 2. Além disso, os filtros foram comparados para averiguar se o filtro de partículas AR teve um desempenho superior que o do filtro SIR, como foi discutido em Marques e Storvik (2013).

Para algoritmos de filtros de partículas a solução numérica de ambos os casos foram implementados no software MATLAB, utilizando um notebook com processador Intel(R) Core (TM) i7-5500, CPU @2.40GHz. Para os dois filtros foi utilizada a distribuição gaussiana (DG) para geração das partículas.

Para analisar melhor os resultados gerados, foi utilizado a Equação (60), que calcula o erro quadrático médio (RMS), para todos os problemas estudados.

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_m(t) - X_0(t))^2} \quad (60)$$

na qual, X_m representa as variáveis de estados encontradas pelo filtro de partículas, X_0 os valores exatos e N é o número de pontos (SILVA, 2012, VIANNA, 2010).

A Equação (61) mostra a região de confiança de 99% e foi usado para ajudar na avaliação dos resultados gerados (SILVA, 2012, VIANNA, 2010).

$$I_{99\%} = x_t \pm 2.57\sigma_x \quad (61)$$

Sendo que x_t representa a variável de estado estimada e σ_x o desvio padrão da população de partículas geradas.

6.1 Caso 1

Para esse problema, foi utilizado o método numérico das diferenças finitas central, com uma malha de 101 amostragens espaciais para obter as medidas simuladas e descrever a solução do problema de Buckley-Leverett. A tais medidas foram acrescentadas um ruído de 15% da saturação máxima, como descrito na seção 5.1.2. Para a estimação da saturação com os filtros de partículas SIR e AR, foi usada uma malha de 51 amostragens espaciais para evitar o crime inverso.

As medidas, para os dois filtros, foram tomadas na posição 0,6, sendo uma escolha arbitrária, para analisar o comportamento da saturação com o passar do tempo, sendo o tempo de amostragem de 0,02 segundos. As medidas simuladas com ruídos foram assumidas como não correlacionadas, aditivas e com média zero. O valor do parâmetro de ajuste para este caso foi $\sigma_t = 0,0001$.

A Figura 5 apresenta o resultado para o filtro de partícula SIR, com 500 partículas. Este estudo foi apresentado por Hoffmann (2014), no qual foi estudado o desempenho deste para a estimação da saturação da água (S).

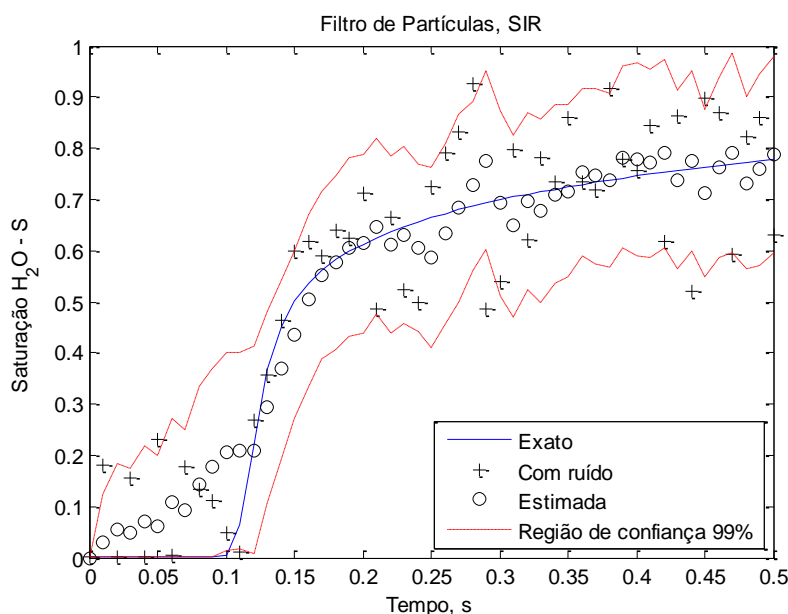


Figura 5- Estimativa da saturação para o Modelo de Buckley-Leverett usando o filtro SIR para 500 partículas.

As Figuras 6 - 9 apresentam a estimativa da saturação de água, utilizando o filtro de partículas AR com 20, 50, 100 e 500 partículas. Esses números foram escolhidos de forma aleatória, pois cada problema exige uma certa quantidade de partículas para

obter uma boa solução, com uma região de confiança de 99%, para garantir a captura de todos os valores da saturação.

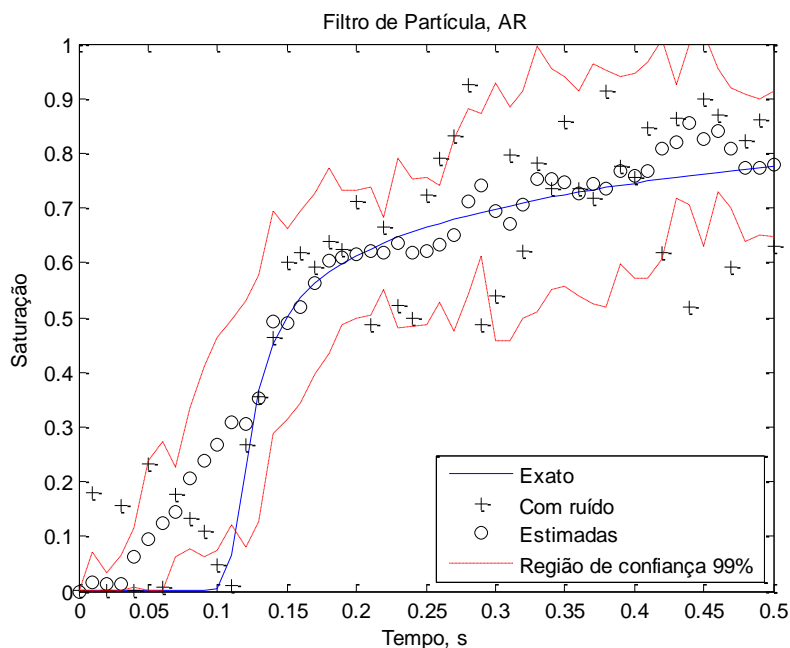


Figura 6 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckley-Leverett usando o filtro AR para 20 partículas.

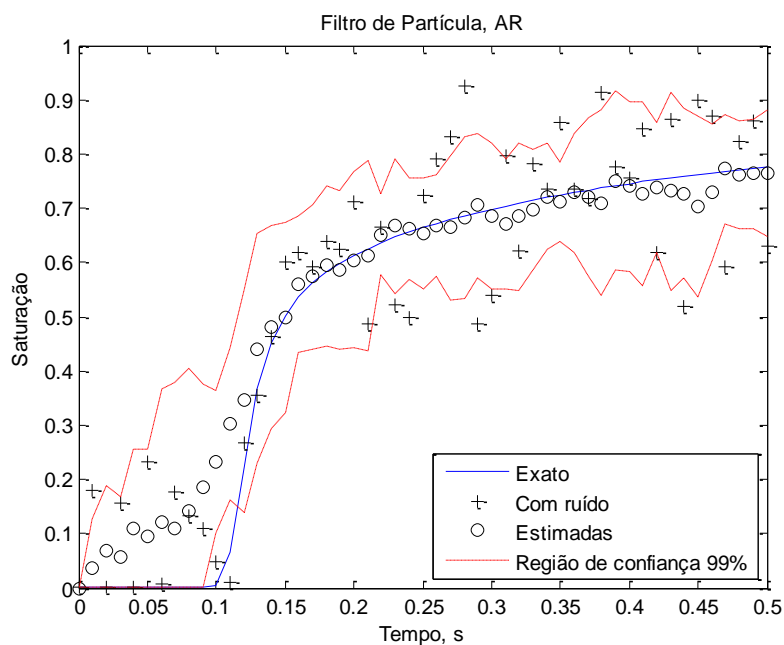


Figura 7 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckley-Leverett usando o filtro AR para 50 partículas.

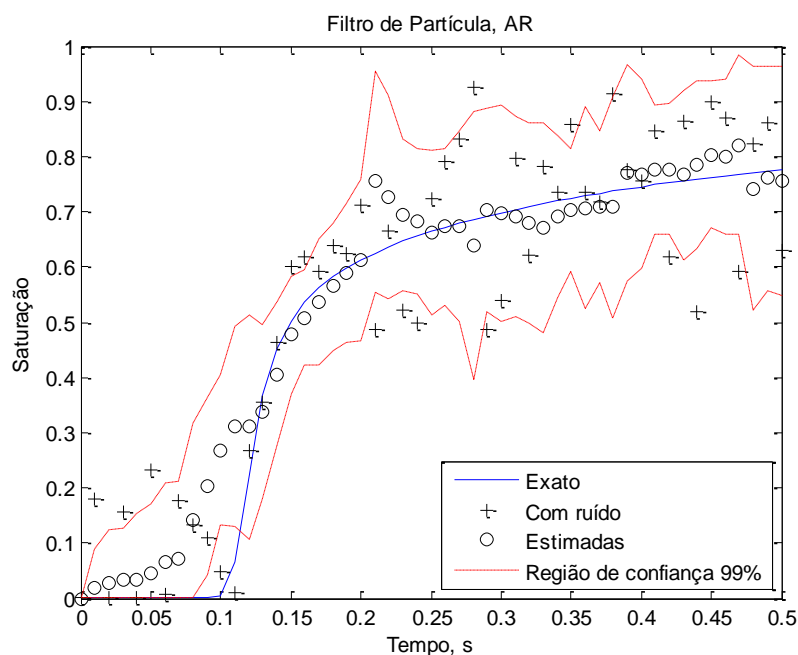


Figura 8 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckley-Leverett usando o filtro AR para 100 partículas.

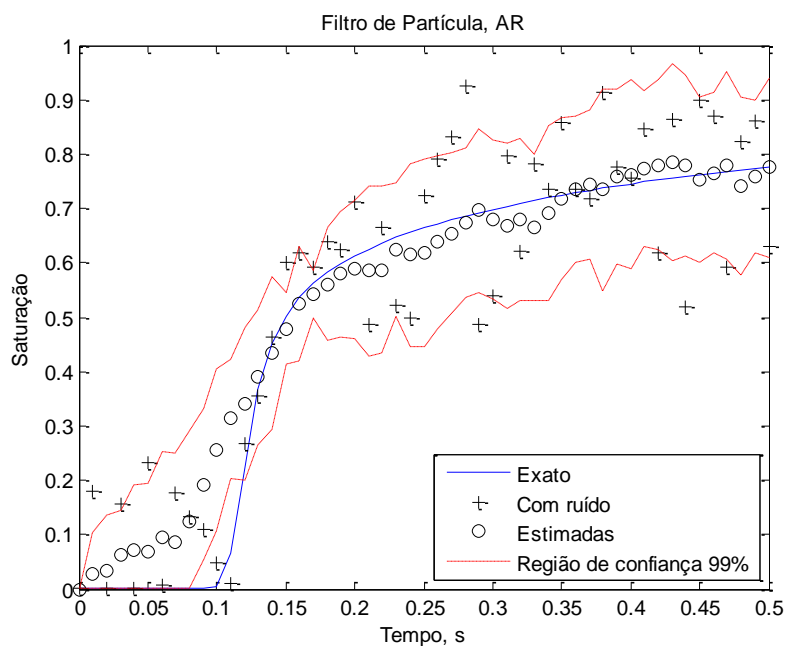


Figura 9 - Estimativa da saturação para o Modelo de Buckley-Leverett usando o filtro AR para 500 partículas.

Ao se analisar as Figuras 6 - 9, observa-se uma melhora na estimativa da variável saturação à medida que aumenta o número de partículas, além disso os dados estimados apresentam curvas mais suaves. Porém para o intervalo de tempo de 0 a

0,1 os valores estimados obtiveram um maior afastamento dos dados exatos, isso pode ser devido a escolha de uma malha não refinada para evitar o crime inverso.

A Tabela 9 apresenta o número de partículas testadas para os dois filtros, junto com os seus resultados para o tempo de CPU e os erros RMS.

Tabela 9 - Resultado dos filtros AR e SIR para diferentes números de partículas.

Filtros	Número de partículas	Erro RMS	Tempo de CPU (s)
AR	20	0,0549	21,17
	50	0,0365	47,20
	100	0,0401	92,01
	500	0,0477	323,47
SIR	500	0,1102	344,14

Observando a Tabela 9, tem-se que o filtro AR à medida que aumenta o número de partículas o RMS diminui. Este comportamento já era esperado, pois a convergência destes métodos é garantida pelo Teorema dos Grandes Números, ou seja, quanto maior for o número de partículas, maior será a probabilidade de convergir. Comparando o filtro AR e SIR para 500 partículas, o AR apresentou o melhor resultado analisando o RMS, porém para o filtro SIR o tempo de simulação foi menor, apesar de ser tratado como um processo estocástico.

Ao analisar o filtro AR com 50 partículas e o filtro SIR com 500, nota-se que o filtro AR teve melhor desempenho para o erro RMS e o tempo de CPU, ou seja, o filtro AR se torna uma escolha mais atraente devido a esses fatores. Além disso, o uso de 100 partículas foi suficiente para a estimação da saturação de água, pois o erro RMS comparado com o de 500 partículas não obteve um ganho significativo para justificar esse aumento, devido ao valor estimado está bem próximo do valor simulado. Além disso o tempo de CPU também deve ser levado em conta, sendo que para 500 o tempo teve um aumento de quase 4 vezes.

Isto foi devido a abordagem sugerida pelos autores Marques e Storvik (2013) para o filtro AR, no qual tende a reduzir a degeneração dos pesos e ao mesmo tempo aumentar a diversidade da amostra, caso que não acontece no filtro SIR e permite uma flexibilidade para reponderar as amostras utilizando um peso adequado no que diz respeito à distribuição utilizada. Desta forma, o filtro AR possui melhor desempenho ao estimar o comportamento da saturação ao longo do tempo.

6.2 Caso 2

No problema de van der Vusse, foi utilizada a rotina *ode15s* para resolver o sistema de EDOs descrito na seção 5.2.2, sendo o tempo de amostragem utilizado de 0,1 horas. Para as medidas simuladas foram acrescentadas um ruído de 5% da temperatura máxima (escolha aleatória), considerando-se a variável mensurável. As medidas simuladas com ruídos foram assumidas como não correlacionadas, aditivas e com média zero. Condições iniciais $\mathbf{x}_0 = [1,278 \ 0,92 \ 93,59 \ 104,9]$ e o valor do parâmetro de ajuste para foi $\sigma_t = 0,9$.

As Figuras 10 - 18 apresentam os resultados para o filtro de partícula AR, com 50, 100 e 500 partículas, para a temperatura (T) do reator e as concentrações, respectivamente, com um intervalo de credibilidade de 99%.

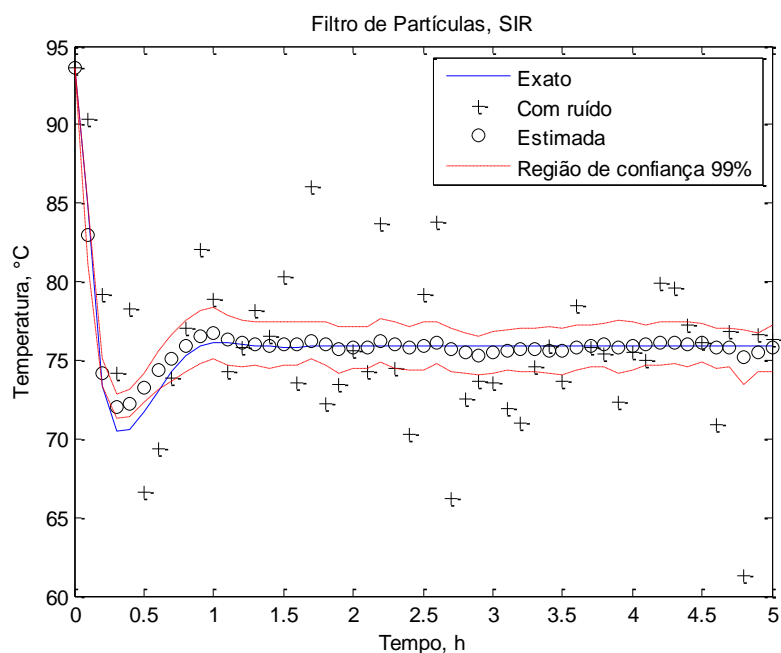


Figura 10 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 50 partículas.

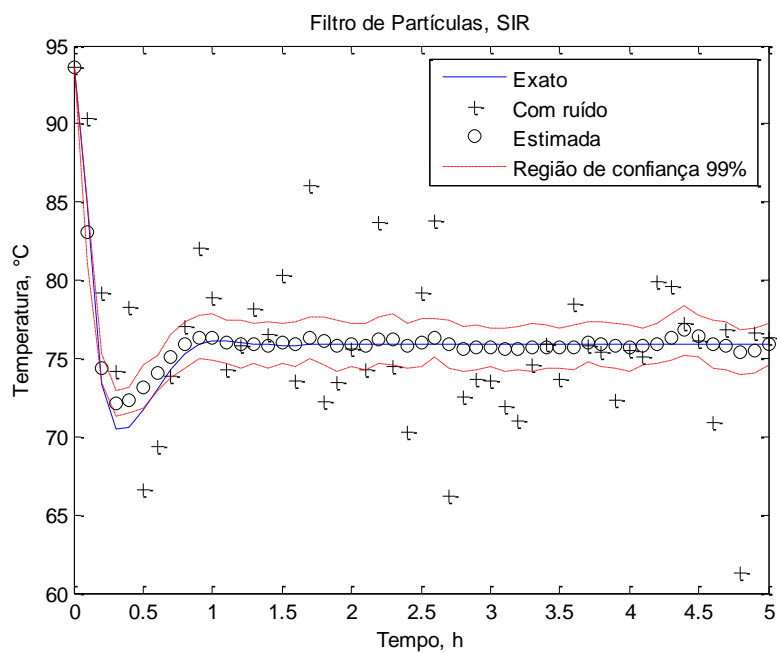


Figura 11 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 100 partículas.

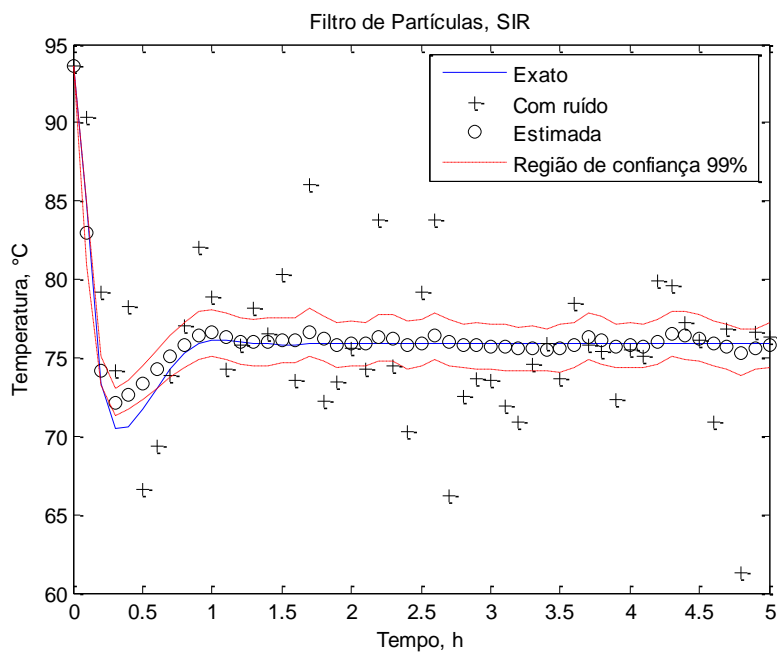


Figura 12 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 500 partículas.

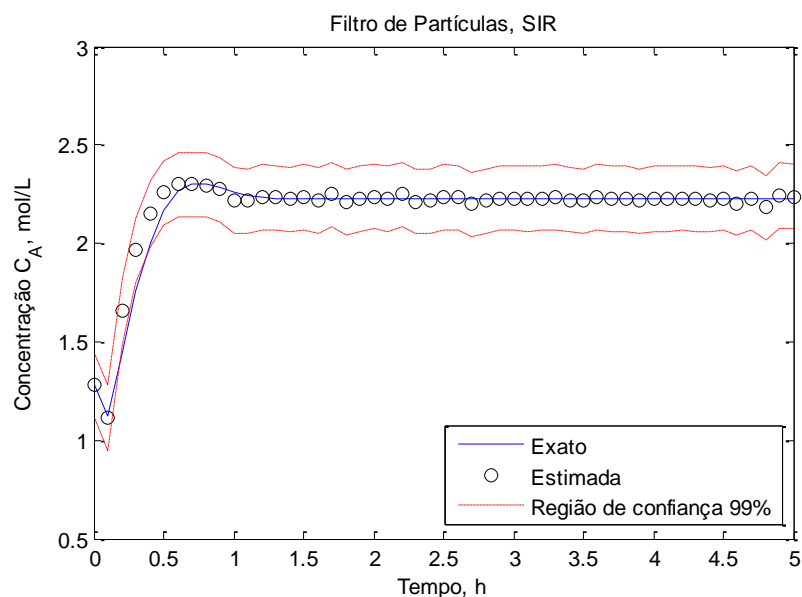


Figura 13 - Estimativa da concentração de A para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 50 partículas.

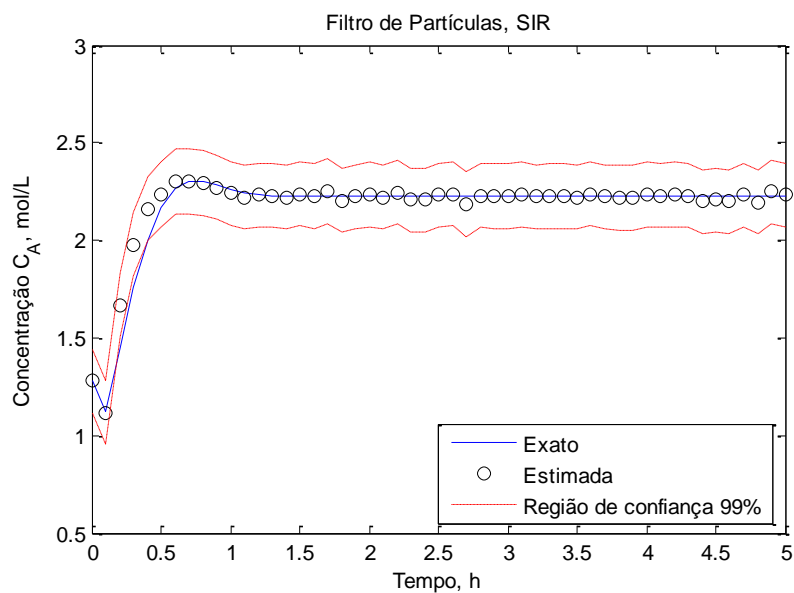


Figura 14 - Estimativa da concentração de A para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 100 partículas.

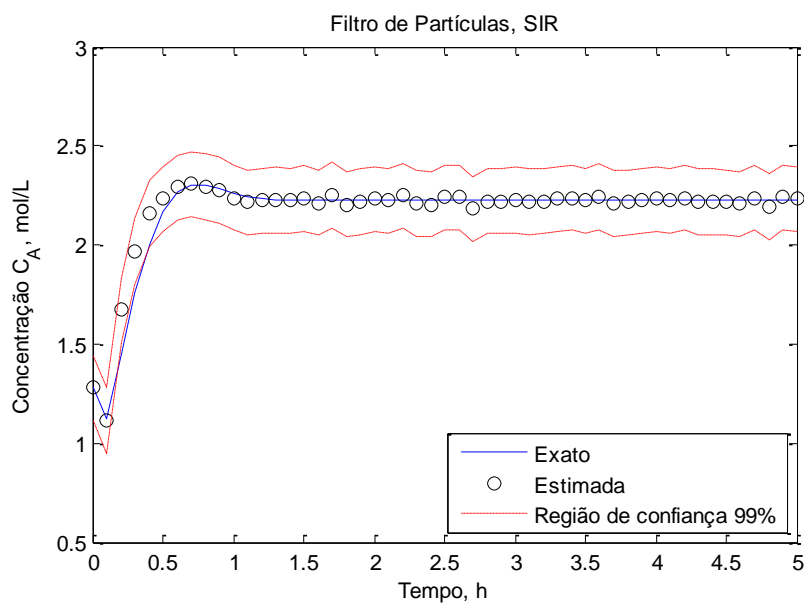


Figura 15 - Estimativa da concentração de A para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 500 partículas.

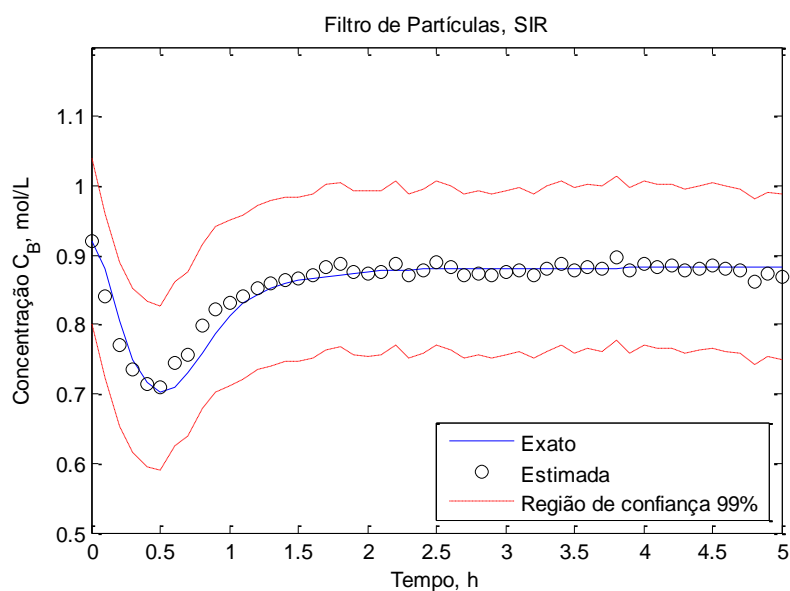


Figura 16 - Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 50 partículas.

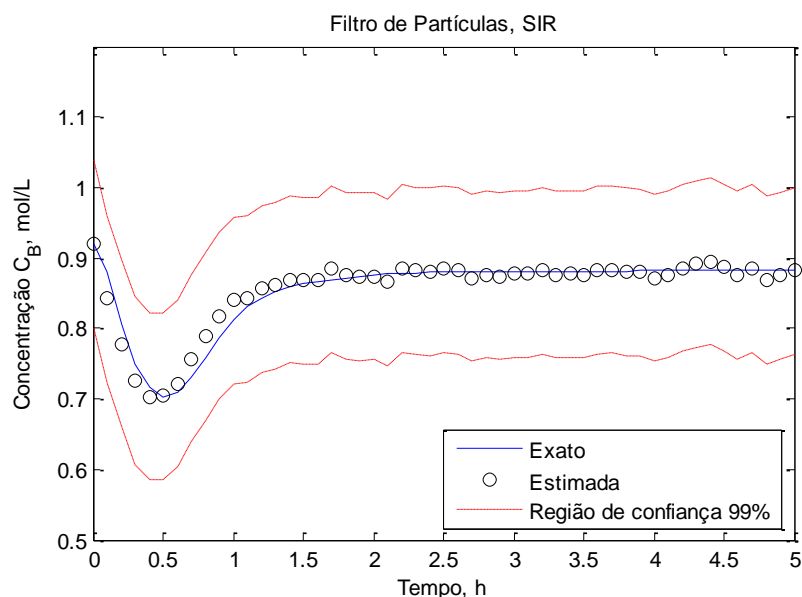


Figura 17 - Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 100 partículas.

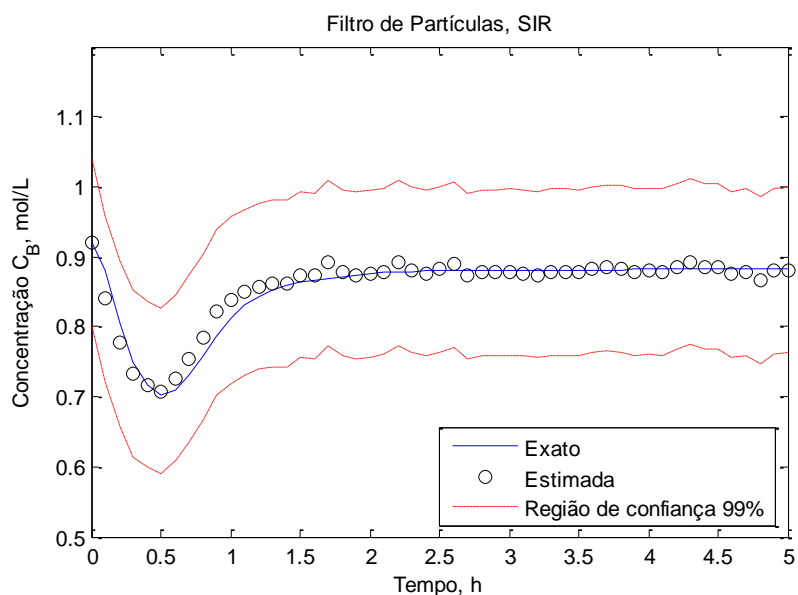


Figura 18 - Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro SIR para 500 partículas.

Analisando as Figuras 10 - 18 percebe-se que o filtro SIR conseguiu uma boa estimativa das concentrações de C_A e C_B , sendo C_B o produto desejado da reação estudada na seção 5.2. Além disso, foi eficiente ao tentar diminuir o ruído da temperatura dentro do reator. As previsões dos estados feitas pelo filtro AR são mostradas nas Figuras 19 - 21, utilizando 50 partículas ambos para temperatura T e concentrações. Esse número de partículas foi usado afim de averiguar se essa

metodologia possuiu algum benefício em relação a quantidade de partículas utilizadas para a estimação, como foi visto no Caso 1.

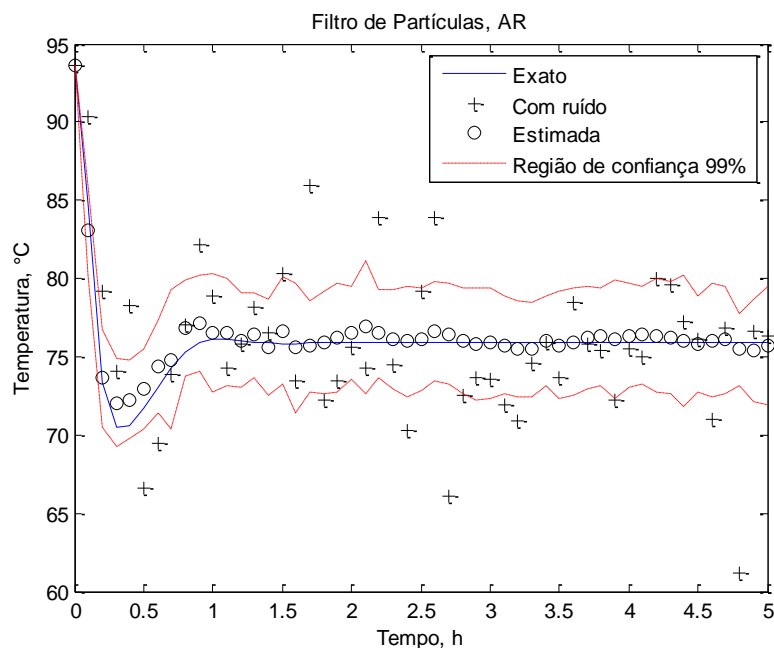


Figura 19 - Estimativa da temperatura para o problema de van der Vusse, usando o filtro AR para 50 partículas.

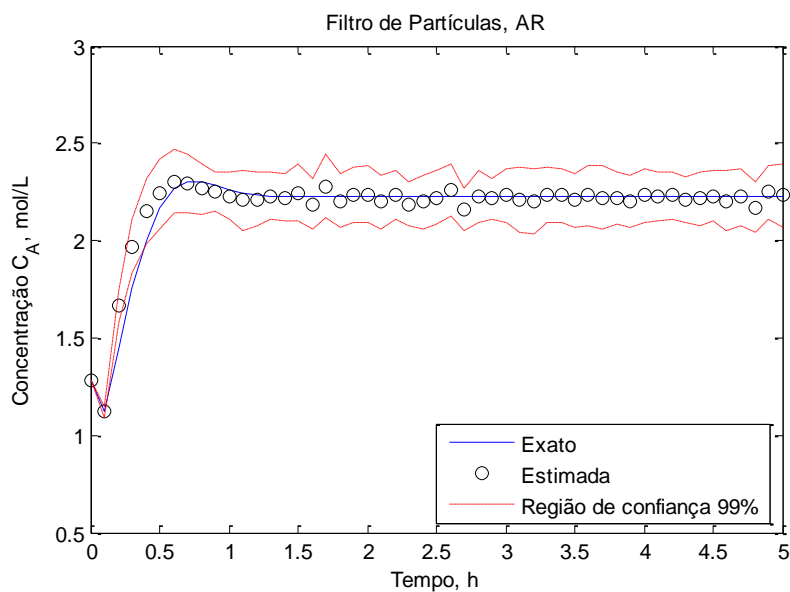


Figura 20 - Estimativa da concentração de A para o problema de van der Vusse, usando o filtro AR para 50 partículas.

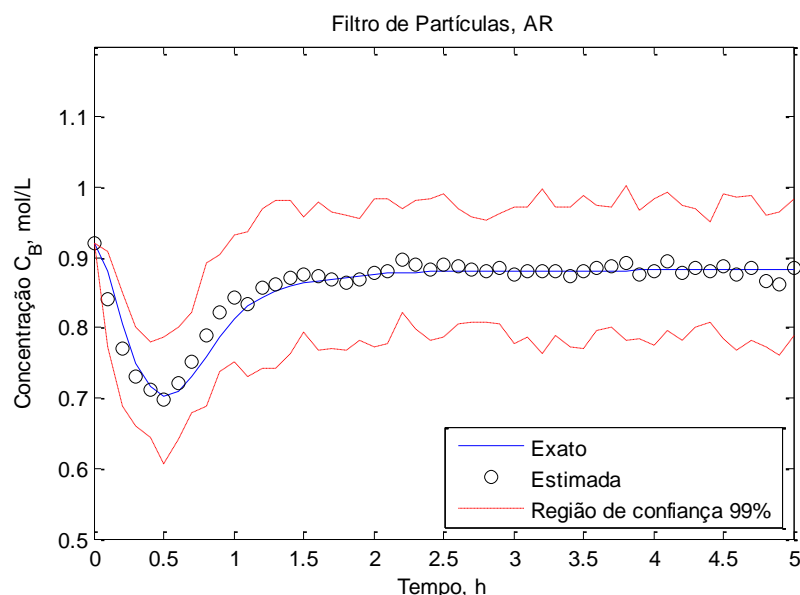


Figura 21 - Estimativa da concentração de B para o problema de van der Vusse, usando o filtro AR para 50 partículas.

Já para as Figuras 19 – 21 o filtro AR obteve bons resultados tanto ao estimar as concentrações quanto ao diminuir o ruído da temperatura apenas com 50 partículas. A Tabela 10 apresenta o número de partículas testadas para os dois filtros, junto com os seus resultados para o tempo de CPU e os erros RMS.

Tabela 10 - Resultado dos filtros AR e SIR para diferentes números de partículas.

Filtros	Número de partículas	Erro RMS	Tempo de CPU (s)
AR	50	1,146	17,31
SIR	50	1,717	16,45
	100	1,194	33,31
	500	0,501	126,61

O filtro AR com apenas com 50 partículas exibiu menor erro RMS comparado com o filtro SIR e descreveu melhor o comportamento das concentrações de C_A , C_B e T , como pode ser visto nas figuras. Isso se deu ao fato da metodologia abordada neste filtro, que tenta atrasar ou evitar a necessidade do passo de reamostragem, ou seja, os pesos ficam mais próximos de 1, e ao mesmo tempo, aumenta a diversidade da amostra, como já foi explicado na seção 4.5. Os resultados obtidos através da tabela mostraram o mesmo comportamento notado no caso 1, no qual o filtro AR com poucas partículas superou o desempenho do filtro SIR. Neste caso para 100 partículas o erro

RMS e tempo de CPU para o filtro SIR foi maior em relação a 50 partículas utilizada pelo filtro AR. Esses dados mostram o benefício da metodologia do filtro AR quando se utiliza poucas partículas.

Comparando os erros RMS para 50, 100 e 500 partículas para o filtro SIR, nota-se que o erro diminuiu com o aumento do número de partículas. Esse comportamento já era esperado, pois quanto maior o número de partículas, maior é a probabilidade de convergência do método.

Desta forma, o filtro AR obteve melhor desempenho em relação ao filtro SIR, para estimação das concentrações de C_A e C_B , e diminuição do ruído da temperatura.

7 CONCLUSÃO

Neste capítulo são sintetizados as principais ações e resultados desta dissertação. Além de serem indicadas possíveis direções para trabalhos futuros.

O principal objetivo desse trabalho foi aplicar o filtro AR, sendo que este não possui aplicações práticas na área da engenharia, e seu desempenho foi comparado com o filtro SIR. Para tal, foram abordados dois casos para fazer essa análise: o problema de Buckley-Leverett para um reservatório de petróleo, e o sistema de reação de van der Vusse, conhecido como benchmark da engenharia química.

A principal diferença entre os filtros foi o uso da metodologia do filtro SIR juntamente com passos do MCMC para calcular novas funções de distribuições de probabilidades (*probability distribution function* – PDF), que são necessárias para o cálculo do peso, e o cálculo do gradiente da distribuição alvo não normalizada, que tem como missão direcionar as novas partículas ($x_{1:t}^*$) para uma região de maior probabilidade de ocorrência, evitando assim a necessidade da reamostragem. Os algoritmos de partículas SIR e AR foram implementados no software MATLAB, bem como a simulação do problema direto, para a estimação da saturação da água, caso 1, e estimação da temperatura do reator e as concentrações C_A e C_B .

Nos estudos de simulação abordados neste trabalho o algoritmo AR pode reduzir com sucesso a degeneração do peso e, ao mesmo tempo, aumentar a diversidade de amostras. Além disso, também foi mostrado o benefício dessa metodologia para um pequeno número de partículas como mostrado para os dois casos e, ao executar a atualização do passo móvel MCMC, os pesos podem ser atualizados simultaneamente, tornando-os menos variáveis. Ambos os filtros obtiveram resultados satisfatórios, porém para os dois casos estudados o filtro AR teve um desempenho melhor em relação ao filtro SIR quando se analisou os erros RMS e as figuras.

Como sugestões de trabalho futuros, seria interessante a implementação de um modelo mais completo para reservatório de petróleo juntamente com correspondência história e o estudo de novas aplicações para o algoritmo AR. Sugere-se também um estudo mais aprofundado sobre o gradiente utilizado para calcular as PDFs, que influência no cálculo dos pesos, ou seja, importante para evitar ou atrasar o passo de reamostragem.

REFERÊNCIAS

AKESSON, B. M.; JORGENSEN, J. B.; POULSEN, N. K.; JORGENSEN, S. B. A Generalized Autocovariance Least-Squares Method for Kalman Filter Tuning. **Journal of Process Control**. v 18, p 769-779. 2008.

ARULAMPALAM, M.; MASKELL, S.; GORDON, N.; CLAPP, T. A tutorial on particle filters for on-line non-linear/non-gaussian Bayesian tracking, **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 50, n. 2, p. 174 - 188, 2002.

BISHOP, C.M. **Pattern Recognition and Machine Learning**. Cambridge: Springer, 2006.

BOLFARINE, H.; SANDOVAL, M. **Introdução à Inferência Estatística**. São Paulo, 2000. Disponível em: http://venus.est.ufmg.br/pub/denise/2015/Infer%EAncia/LIVRO_Bolfarine_Sandoval.pdf, Acesso em: 20/12/2016:

BUCKLEY, S. E.; LEVERETT, M. C. Mechanism of fluid displacement in sands. **Petrol. Trans. AIME**, vol. 146, p. 107-116, 1942.

CAPPE, O.; GODSILL, S. J.; MOULINES, E. An overview of existing methods and recent advances in sequential Monte Carlo. **Proceedings of the IEEE**, v. 95, n. 5, p. 899-924, 2007.

CHEN, H.; KREMLING, A.; ALLGÖWER, F. Nonlinear Predictive Control Of A Benchmark CSTR. In **Proceedings of 3rd European Control Conference**, p 3247-3252. 1995.

CHEN, T.; MORRIS, J.; MARTIN, E. Particle Filters for State and Parameter Estimation in Batch Processes. **Journal of Process Control**, v. 15, p. 665–673, 2005.

CHEN, Z.; HUAN, G.; MA, Y. **Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media**. Filadélfia: SIAM, 2006.

COSTA, J. M. J. **Problema de Estimativa de Estado e de Estimativa Simultânea de Modelos e Parâmetros em Crescimento de Tumores**. 2015. 188 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro, 2015.

COSTA, J. M. J.; ORLANDE, H. R. B.; VELHO, H. F. C.; PINHO, S. T. R.; DULIKRAVICH, G. S.; COTTA, R. M.; DA CUNHA NETO; S. H. Estimation of Tumor Size Evolution Using Particle Filters. **Journal of Computational Biology**, v. 22, n. 7, p. 1-17, 2015.

DOUCET, A.; FREITAS, N.; GORDON, N. **Sequential Monte Carlo Methods In Practice**. New York, NY: Springer, 2001.

FARIAS, A. A; SOARES, J. F; CÉSAR, C. C. **Introdução à Estatística**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2003.

GILKS, W.; BERZUINI C. Following a moving target Monte Carlo inference for dynamic Bayesian models. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)**. v. 63, n. 1, p. 127-146, 2001.

GORDON, N. J.; SALMOND, D. J.; SMITH, A. F. M. Novel approach to nonlinear/non Gaussian Bayesian state estimation. **IEE Proceedings-F**, v. 140, n. 2, p.107-113, 1993.

HADAMARD, J. **Lectures on Cauchy problem in linear partial differential equations**. Dover Publications, New York, 1953.

HANEA; A. M.; GHEORGHE, M. Parameter Estimation In A Reservoir Engineering Application. **Advances in Safety and Risk Management**. p 105-111. 2011.

HEIMHUBER, R. **Efficient History Matching for Reduced Reservoir Models with PCE-based Bootstrap Filters**. 2012. 59 f. Thesis, University of Stuttgart, Sonthofen, 2012.

HOFFMANN, R. X. **Aplicação De Filtros Bayesianos Em Um Escoamento Bifásico Óleo-Água Em Reservatório De Petróleo**. 2014. 45 f. Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Engenharia Química) –Programa de Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Espírito Santo, Alegre, 2014.

HOFFMANN, R. X.; Da SILVA, W. B.; DUTRA, J. C. S.; MARQUESR. A. G. Aplicação de Filtros Bayesianos em um Escoamento Bifásico Óleo-Água em Reservatório de Petróleo. **XI Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica**. Unicamp -Campinas, v. 1, n. 3, 2015.

HOFFMANN, R. X.; da SILVA, W. B.; DUTRA, J. C. S.; VIEIRA, F. T.; DIAS, A. C. S. R. Application of State Estimation with Particle Filter in Chemical Reactors. **XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química**. Ceará - Fortaleza, 2016.

JORGENSEN, J. B. A Critical Discussion of the Continuous-Discrete Extended Kalman Filter. In **6th European Congress of Chemical Engineering**. 2007.

KAIPPIO, J.; SOMERSALO, E. **Statistical and computational inverse problems**. New York: Springer, 2004.

KONG, A.; LIU, J. S.; WONG, W.H. Sequential imputations and bayesian missing data problems. **Journal of the American Statistical Association**, v. 89, n. 425, p. 278–288, 1994.

KUNTANAPREEDA, S.; MARUSAK, P. M. Nonlinear Extended Output Feedback Control for CSTR With Van De Vusse Reaction. **Process dynamics, control and monitoring**, v 41, p 10-23. 2012.

LEVEQUE, R. J. **Finite volume methods for hyperbolic problems**. Cambridge Texts in Applied Mathematics, University of Cambridge, 2004.

LIU, J.; WEST, M. Combined Parameter and State Estimation in Simulation Based Filtering. In: S. A. Doucet, N. de Freitas, and N. Gordon, (eds.), **Sequential Monte Carlo Methods in Practice**. New York. p.197–217, 2001.

MARQUES, R.; STORVIK, G. Particle move-reweighting strategies for online inference. **Statistical Research Report - UCL**. n. 1, p. 1-20, 2013.

MIGON, H. S.; GAMERMAN, D.; LOUZADA, F. **Statistical inference: an integrated approach**. London: Arnold, 2015.

OLIVEIRA, A. B. **Filtro de Partículas Adaptativo para o Tratamento de Oclusões no Rastreamento de Objetos em Vídeos**. 2008. 58 f. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2008.

OLIVER, D. S.; REYNOLDS, A. C.; LIU, N. **Inverse Theory for Petroleum Reservoir Characterization and History Matching**. New York: Cambridge, 2008.

ORLANDE, H. R. B.; COLAÇO, M. J.; COTTA, C. P. N.; GUIMARÃES, G.; BORGES V. L. **Problemas Inversos em Transferência de Calor**. SBMAC, 1ª Edição, 2011.

PINTO, A. F. C. **Filtro de Partículas: o Algoritmo Resample-Move**. 2007. 67 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) – Programa de Pós-Graduação em Estatística, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2007.

RAGHU, A. **Reservoir History Matching Using Constrained Ensemble Kalman Filter And Particle Filter Methods**. 2014. 126 f. Thesis (Master of Science in Process Control), University of Alberta, Edmonton, 2014.

RIPLEY, B. D. **Stochastic Simulation**. New York: Wiley, 1987.

SCHMIDT, D. M.; GEORGE, J. S.; WOOD, C. C. Bayesian Inference Applied to the Electromagnetic Inverse Problem. **Human Brain Mapping**. Los Alamos. v. 7, p. 195-212, 1999.

SEILER, A.; EVENSEN, G; SKJERVHEIM, J. A.; HOVE, J.; VABO, J. G. Using The Enkf For History Matching And Uncertainty Quantification Of Complex Reservoir Models. **Computational Methods for Large-Scale Inverse Problems and Quantification of Uncertainty**. John Wiley & Sons. Book Chapter, 2009.

SILVA, W. B. **Aplicação de Filtros de Partículas para a Assimilação de Dados em Problemas de Fronteira Móvel**. 2012. 162 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2012.

TONEL, G. **Avaliação dos Estimadores EKF, CEKF e MHE para Aplicações em Linha em Processos**. 2008. 115 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2008.

VALAPPIL, J.; GEORGAKIS, C. Systematic Estimation of State Noise Statistics for Extended Kalman Filters. **AIChE Journal**, v 46, n 2, p 292-308. 2000.

VALLE, C. A. A. **Métodos de Simulações Estocásticas em Modelos Dinâmicos não Lineares: Uma Aplicação em Modelos de Volatilidade**. Tese (Doutorado em Estatística) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005.

VAN DE VUSSE, J. G. Plug-Flow Type Reactor Versus Tank Reactor. **Chemical Engineering Science**. v 19, p 994-997. 1964.

VIANNA, F. L. V. **Estimação de Estado e Controle Ótimo Aplicado a um Sistema de Aquecimento Ativo em Duto Multicamadas**. 2010. 204 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

ZHAO; Z.; HUANG, B.; LIU, F. A Particle Filter Based on a Constrained Sampling Method for State Estimation. **In 15th International Conference on Information Fusion (FUSION)**. p 813-826. 2012.

ZHAO, Z.; SHAO, X.; HUANG, B.; LIU, F. On-Line Estimation of Glucose and Biomass Concentration in Batch Fermentation Process Using Particle Filter with Constraint. **Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering**. v 7, p 678-686. 2012.